
Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica
Departamento de Matemática Aplicada

**Influência de Poluentes sobre Macroalgas na
Baía de Sepetiba, RJ: Modelagem
Matemática, Análise Numérica e Simulações
Computacionais**

Luciana Carrara Abreu*

Mestrado em Matemática Aplicada - Campinas - SP

Orientador: Prof. Dr. João Frederico da Costa A. Meyer

* Este trabalho teve apoio financeiro da CAPES.

**Influência de Poluentes sobre Macroalgas
na Baía de Sepetiba, RJ: Modelagem Matemática,
Análise Numérica e Simulações Computacionais**

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por **Luciana Carrara Abreu** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 27 de Abril de 2009



Prof. Dr. João Frederico da C. A. Meyer
Orientador

Banca Examinadora:

1. Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer (DMA/IMECC/Unicamp)
2. Prof. Dr. Laércio Luis Vendite (DMA/IMECC/Unicamp)
3. Profa. Dra. Rosana Sueli da Motta Jafelice (FM/CCET/UFU)

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Unicamp, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**
Bibliotecária: Maria Fabiana Bezerra Müller – CRB8 / 6162

Abreu, Luciana Carrara

Ab86i Influência de poluentes sobre macroalgas na Baía de Sepetiba, RJ :
modelagem matemática, análise numérica e simulações computacionais/
Luciana Carrara Abreu -- Campinas, [S.P. : s.n.], 2009.

Orientador : João Frederico da Costa Azevedo Meyer

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas,
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1.Simulação (Computadores). 2.Análise numérica. 3.Galerkin,
Métodos de. 4.Método de elementos finitos. 5.Poluentes. 6.Alga
marinha. . I. Meyer, João Frederico da Costa Azevedo. II. Universidade
Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica. III. Título.

(mfbm/imecc)

Título em inglês: Macroalgal populations under the influence of pollution at Sepetiba Bay, RJ,
Brazil : mathematical modelling, numerical analysis and computational simulations

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Computer simulation. 2. Numerical analysis. 3.
Galerkin methods. 4. Finite element method. 5.Pollutants. 6. Marine algae.

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada

Banca examinadora: Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. Laércio Luis Vendite (IMECC-UNICAMP)
Profª. Dra. Rosana Sueli da Motta Jafelice (CCET-UFU)

Data da defesa: 27/04/2009

Programa de Pós-Graduação: Mestrado em Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado defendida em 27 de abril de 2009 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



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



Prof(a). Dr(a). LAÉRCIO LUIS VENDITE



Prof(a). Dr(a). ROSANA SUELI DA MOTTA JAFELICE

*Dedido este trabalho
ao meu pai Augusto, à minha mãe Lucila
e aos meus Rodrigos, essenciais em minha vida!*

Agradecimentos

Agradeço:

Primeiramente a Deus, que nunca me abandona, à minha mãe Lucila que sempre me protege com sua oração, ao meu pai Augusto e ao meu irmão Rodrigo, por serem essa família tão perfeita. Sem seu amor incondicional, certamente eu nunca teria chegado até aqui e este trabalho nunca teria existido.

Ao meu amor Rodrigo que conheci durante o curso e que foi meu alicerce, me ajudando sempre a superar todos os obstáculos do mestrado, academicamente e psicologicamente. Meus sinceros agradecimentos por sua compreensão, amor e bondade infinitos.

A pessoas especiais como Rogério, pelos conselhos sobre como me organizar no mestrado, tia Bernadete e seu Getúlio, pelas orações e momentos divertidos, que passaram a fazer parte da minha vida e que me acolheram em sua família.

Aos meus primos Maurício e Márcia, à minha tia Isabel e ao meu tio Zezinho, por toda a assistência que dedicaram a mim durante o mestrado. Não somente a eles, mas também à toda minha família de São Paulo, por estarem sempre prontos a me ajudar e cuidar de mim quando meus pais não podem estar por perto.

À minha família de Colatina, de que morro de saudades e que de longe sempre torce por mim.

Ao meu mestre, orientador e amigo Joni, a quem devo tudo o que aprendi durante o mestrado, e a quem devo muito agradecer pela paciência em ensinar e pelo apoio nas horas de dificuldade acadêmica.

Ao professor e amigo Laércio Vendite, por sua generosidade e por ter me acolhido e me ajudado a dar os primeiros passos na Unicamp.

À banca e à professora Rosane pelas ótimas sugestões e idéias para o trabalho e para a continuidade deste.

Aos amigos e companheiros de curso Alexandre, Marta, Miguel, Deccy, Luciana, Elaine, Roberta, João, Mael e outros, pela ajuda e pelos bons momentos. E também às minhas queridas amigas Pâmela e Priscila que, mesmo estando longe, sempre torcem e ficam felizes por mim.

Aos professores da UFES, em especial ao professor Alancardek, pelos ensinamentos e incentivo.

À CAPES pelo imprescindível apoio financeiro, à Secretaria de Pós-graduação e ao Departamento de Matemática Aplicada pela organização, indispensáveis para que eu pudesse ingressar e concluir o mestrado.

Resumo

Este trabalho se constitui numa ferramenta que possibilita melhor avaliar, através de simulações computacionais, como a poluição pode afetar (ou vir a afetar) populações de macroalgas que interagem, também, entre si num importante ecossistema marinho localizado próximo à região metropolitana do Rio de Janeiro, a baía de Sepetiba. Com base no relato de estudos de campo nesta baía, foram reunidas informações sobre as características das principais macroalgas desta região, bem como sobre a poluição e suas influências sobre a flora marinha local. Neste cenário, foi justificadamente construído um modelo evolutivo formado por equações diferenciais parciais que descrevem a interação entre duas espécies de macroalgas sob a influência de um poluente de superfície, que pode ser tóxico ou servir de alimento às plantas marinhas, variando de uma espécie a outra. Inevitavelmente, participam desta interação as células de reprodução de cada espécie de macroalga e, por isso, estão incluídas no modelo. Estão apresentadas as formulações clássica e variacional de um modelo mais simples, com as posteriores discretizações espaciais, em que foi utilizado o método de Elementos Finitos (aqui com elementos triangulares de primeira ordem), e discretização temporal, com o uso do método de Crank-Nicolson, de segunda ordem de aproximação. As discretizações, no modelo mais complexo, seguem passos totalmente análogos aos do modelo mais simples. É também apresentado um capítulo sobre o cálculo das submatrizes de rigidez, necessário para a implementação. Finalmente são mostrados alguns experimentos computacionais que permitem simular situações hipotéticas de risco, com o objetivo de se obter cenários de impactos causados pela poluição sobre a flora marinha local e, com isso, alertar para os problemas gerados pela intervenção antrópica na região e motivar um planejamento de estratégias e políticas de prevenção e de contingência.

Palavras-chave: simulações numéricas, elementos finitos, método de Galerkin-Ritz, equações diferenciais parciais, macroalgas, poluentes, baía de Sepetiba.

Abstract

This work describes a tool created to enable better evaluations - by the adequate use of computational simulations - of how environmental impact can affect (or come to affect) different populations of macroalgae which interact among themselves in an important marine ecosystem located south of Rio de Janeiro state, that of Sepetiba bay. Based upon previous records of local studies in this area, data was collected highlighting characteristics of these species of macroalgae, as well as that of the effect of pollution upon local marine flora. In this general setting, a model was developed based on a non-linear system of partial differential equations that describes the interaction among two distinct species of algae under the impact of a polluting material, an impact that can either be toxic or a nourishment for one or both of these algae. Population dynamics and movements are included in the model, as well as reproduction cells of these species. Classic and variational formulations are presented, with Ritz-Galerkin discretization for space variables, as well as a Crank-Nicolson method for approximations in time, both methods of second-order. Simpler variations of the model (and of the discretized approximation) are presented in order to gain an insight as regards the algorithmic processes. In the more complex situation, a separate chapter describes the numerical and computational tools necessary in the definition of the final schemes. Computationally defined dynamical scenarios are presented, illustrating how risk assessments can be undertaken, simulating the mentioned effects of the presence of polluting materials in the region, creating an important tool for possible effects of the anthropic activities in the region, permitting the planning processes for the establishment of strategies and policies for environmental protection and damage repair.

Keywords: numerical simulations, finite elements, Galerkin-Ritz method, partial differential equations, macroalgae, pollution, Sepetiba bay.

Lista de Figuras

1.1	A baía de Sepetiba.	5
1.2	Localização dos cinco pontos de amostragens na baía de Sepetiba.	7
2.1	Esquema de metagênese.	11
2.2	Esquema simplificado da baía (o domínio Ω) com a faixa Ω_r	14
2.3	Resultado da simulação numérica.	32
3.1	O domínio Ω_h e a faixa Ω_r	43
3.2	O domínio Ω discretizado.	44
3.3	Representação de uma função φ_i	45
3.4	Transformação aplicada a um triângulo.	51
4.1	Cenário obtido a partir da simulação 1a.	60
4.2	Cenário obtido a partir da simulação 1b.	61
4.3	Cenário obtido a partir da simulação 1c.	62
4.4	Cenário obtido a partir da simulação 2a.	63
4.5	Cenário obtido a partir da simulação 2b.	64
4.6	Cenário obtido a partir da simulação 2c.	65
4.7	Cenário obtido a partir da simulação 3a.	66
4.8	Cenário obtido a partir da simulação 3b.	67

Lista de Tabelas

4.1	Parâmetros utilizados nas simulações numéricas.	58
4.2	Parâmetro de transporte.	59

Notações utilizadas

- $\Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow$ domínio espacial bidimensional objeto do estudo evolutivo,
- $t \rightarrow$ variável temporal,
- $J = (0, T] \rightarrow$ intervalo temporal,
- $\mathbf{x} = (x, y) \rightarrow$ variável espacial,
- $L^2(\Omega) = \left\{ u(\mathbf{x}); \int_{\Omega} |u|^2 ds < \infty \right\} \rightarrow$ conjunto das funções quadrado integráveis sobre Ω , sendo a integral no sentido de Lebesgue,
- $H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega); \frac{\partial v}{\partial x} \in L^2(\Omega) \text{ e } \frac{\partial v}{\partial y} \in L^2(\Omega) \right\} \rightarrow$ conjunto das funções de $L^2(\Omega)$ tais que suas derivadas parciais espaciais de primeira ordem também pertencem a $L^2(\Omega)$,
- $(f|g) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) ds \rightarrow$ produto interno em $L^2(\Omega)$,
- $(\nabla f || \nabla g) = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial y} \right) ds$,
- $\Omega_h \rightarrow$ novos domínios com formato poligonal e que aproximam adequadamente o domínio original Ω ,
- $\Omega_r \subset \Omega \rightarrow$ faixa em torno das ilhas e do continente, onde se supõe uma profundidade propícia para as macroalgas,
- $\mathcal{V}_I = \{w \in H^1(\Omega); w|_{\Gamma_{0_I}} = 0\}$ onde I representa \mathbf{p} , \mathbf{a} ou $\mathbf{e} \rightarrow$ conjunto das funções teste, que se anulam na parte da fronteira onde a condição de contorno é a de Dirichlet homogênea,
- $f_j^n \cong f_j(t_n) \cong f(t_n, \mathbf{x}_j)$,
- $M \rightarrow$ número total de subintervalos do intervalo temporal $J = (0, T]$,
- $\mathcal{T}_h \rightarrow$ triangulação do domínio Ω_h ,
- $N \rightarrow$ número total de nós (neste caso, os vértices dos triângulos) da triangulação \mathcal{T}_h ,
- $NT \rightarrow$ número total de triângulos da triangulação \mathcal{T}_h ,
- $T_0 \rightarrow$ triângulo dito de referência cujos vértices têm coordenadas dadas por $\xi_1 = (0, 0)$, $\xi_2 = (1, 0)$ e $\xi_3 = (0, 1)$,
- $T_p \rightarrow$ triângulo genérico cujos vértices têm coordenadas dadas por $\mathbf{x}_1 = (x_1, y_1)$, $\mathbf{x}_2 = (x_2, y_2)$ e $\mathbf{x}_3 = (x_3, y_3)$.

Sumário

Introdução	1
1 Estudos Preliminares	3
2 Interação entre uma Espécie de Alga e um tipo de Poluente	9
2.1 Construção do Modelo	9
2.2 Formulação Variacional	12
2.3 Discretização Espacial: Galerkin-Ritz	21
2.4 Discretização Temporal: Diferenças Finitas	29
2.5 Simulação Numérica	32
3 Interação entre duas Espécies de Algas e um tipo de Poluente	33
3.1 Apresentação do Modelo	33
3.2 O Modelo Discretizado	37
3.3 Método dos Elementos Finitos	43
3.4 Cálculo das Submatrizes de Rigidez	51
4 Simulações Numéricas	57
4.1 Simulação 1a	60
4.2 Simulação 1b	61
4.3 Simulação 1c	62
4.4 Simulação 2a	63
4.5 Simulação 2b	64
4.6 Simulação 2c	65
4.7 Simulação 3a	66
4.8 Simulação 3b	67
5 Conclusões	69
Referências Bibliográficas	71
A Implementação Computacional	74

Introdução

A poluição das águas, em especial das águas do mar, é motivo de muita inquietação e de muitos estudos recentes. O índice crescente de poluição das águas marinhas é causado principalmente pela rápida expansão das regiões industriais e metropolitanas. Esse fato é atualmente motivo de grande preocupação, visto que muitas espécies de animais e plantas que habitam os ambientes marinhos costeiros estão desaparecendo devido ao lançamento de efluentes domésticos urbanos e industriais no mar. O desaparecimento de espécies de algas marinhas põe em risco a sobrevivência de alguns animais que as usam como refúgio, alimento ou até habitat. A eliminação de certas espécies de algas é causada principalmente pela poluição.

É grande a importância de estudos que desenvolvam ferramentas que permitam simular situações de risco com vistas a estabelecer estratégias e políticas de prevenção, de contingência e até, em casos extremos, de recuperação de ambientes, a fim de construir estratégias para a resolução de problemas ambientais que podem ser evitados ou, pelo menos, amenizados. Com esta motivação foi desenvolvido este trabalho, que é um alerta aos problemas ambientais envolvendo a poluição e a presença de macroalgas na baía de Sepetiba, um importante ecossistema marinho do Rio de Janeiro.

Por outro lado, a introdução de novas espécies com fins comerciais e até de preservação podem ter (e, no passado, de fato tiveram, em casos ambientalmente impactantes) consequências severas e até irreversíveis para o meio imediato e sua biota.

Neste trabalho pretendemos fazer uma análise da dinâmica populacional e da interação entre macroalgas e poluentes na baía de Sepetiba, utilizando para isto ferramentas matemáticas de modelagem e esquemas computacionais de simulação. O estudo consiste em:

- Reunir informações suficientes sobre a baía de Sepetiba, bem como sobre as características das principais espécies de macroalgas e de tipos de poluentes presentes nesta baía;
- A partir das informações reunidas, montar um modelo matemático que simule o comportamento da interação desse conjunto de elementos;
- Resolver numericamente o modelo matemático usando mecanismos computacionais adequadamente dimensionados;

- Realizar experimentos computacionais que possam ser transmitidos com clareza ao leitor, afim de que os resultados apresentados possam chegar aos estudiosos de qualquer área, atingindo assim o objetivo deste trabalho.

No capítulo 2 realizaremos a introdução de alguns conceitos básicos e iremos descrever algumas informações importantes sobre a baía de Sepetiba, a poluição neste local e a coexistência de poluentes e macroalgas, informações estas que são necessárias para o entendimento da modelagem matemática;

No capítulo 3 iniciaremos a montagem de um modelo matemático que permita simular o comportamento da dinâmica populacional e da interação de uma espécie de macroalga sob a influência de um poluente, e depois realizaremos passo a passo as discretizações matemáticas no modelo, a fim de resolver numericamente o modelo escolhido com o posterior auxílio da ferramenta computacional;

No capítulo 4 incluiremos na interação mais uma espécie de macroalga e proporemos um outro modelo que simule esta nova situação. Para este novo modelo, iremos apenas apresentar o resultado final da discretização e depois apresentaremos um método usado na implementação e faremos algumas explicações necessárias ao entendimento da montagem da implementação computacional;

No capítulo 5 apresentaremos os experimentos realizados com a ferramenta computacional, explicando cada um dos resultados obtidos desses experimentos de modo que eles possam ser passados ao leitor com a maior clareza possível;

Finalmente no capítulo 6 apresentaremos as conclusões deste trabalho;

Apresentaremos ainda um apêndice com a linguagem da implementação computacional utilizada para os experimentos do capítulo 5.

Capítulo 1

Estudos Preliminares

A descrição dos filos que segue abaixo é retirada de [13], onde os autores afirmam que as algas são distribuídas em três diferentes reinos: *Monera*, *Protista* e *Plantae*. A divisão em filos das macroalgas¹ do reino *Plantae* se dá de acordo com suas características:

- Filo *Chlorophyta*, composto por algas verdes que habitam em águas doces ou salgadas, solos úmidos ou troncos, e até áreas congeladas. É importante observar que as algas verdes do fitoplâncton são responsáveis pela maior parte da produção de oxigênio disponível no planeta.
- Filo *Rhodophyta*, composto por algas vermelhas, predominantemente marinhas, comuns em águas tropicais. Geralmente vivem fixadas a rochas ou a outras algas.
- Filo *Phaeophyta*, composto por algas pardas, formando um grupo quase totalmente marinho. Elas dominam costões rochosos, formando imensas florestas submersas. São as maiores algas existentes.

As algas possuem papel ecológico semelhante ao das plantas terrestres. São importantes produtoras primárias de matéria orgânica na base da cadeia alimentar. Também proveem oxigênio para a vida aquática. As algas podem contribuir com a mortalidade em massa de organismos, como é o caso das “marés vermelhas”, mas também contribuem muito favoravelmente para a economia, seja em produtos alimentícios diversos, medicina e indústria química, entre outros.

¹Algas multicelulares com órgãos diferenciados.

As macroalgas são organismos bênticos², os quais, vivem quase toda sua vida fixos a um substrato sólido, principalmente rochas ou corais mortos. Embora talos de macroalgas possam ser vistos flutuando em algumas regiões, este é um fenômeno acidental e temporário. As únicas fases do histórico de vida em que se apresentam livres e integram o plâncton por períodos muito curtos de tempo são as dos esporos e gametas³.

Como qualquer outro organismo fotossintetizante, a distribuição vertical das algas é limitada pela penetração de luz em quantidade suficiente para equilibrar a respiração e manter os processos metabólicos e investimentos na reprodução. Algumas espécies estão adaptadas para resistir a longos períodos de emersão, formando bandas distintas de diferente composição florística nos períodos de marés baixas. Outras algas, por sua vez, não suportam exposição ao ar e vivem permanentemente submersas. (Mais detalhes podem ser encontrados em [1]).

Algumas algas são excelentes indicadores de determinados problemas ecológicos. Por exemplo, quando se vê um tapete de alfaces-do-mar ou de algas azuis num ambiente aquático, isso é normalmente indicador de poluição por excesso de efluentes nitrogenados.

Por vezes as algas planctônicas multiplicam-se demasiado, normalmente em condições de temperatura ótima e de nutrientes abundantes, formando o que se chama “florescimento”. Este fenômeno pode ser uma indicação de poluição e pode levar à destruição da biodiversidade local, uma vez que as algas que morrem são decompostas, levando à diminuição do oxigênio na água. Mas pode também ser um fenômeno natural, que desaparece quando a temperatura muda e quando os nutrientes são esgotados pelas algas.

Um fenômeno semelhante, porém mais grave, acontece quando um grande acúmulo de nutrientes provoca um aumento desenfreado das algas dinofíceas (algas cor-de-fogo), formando o que se chama “maré vermelha”. Nesta situação, estes organismos produzem toxinas avermelhadas e podem provocar a morte de uma grande quantidade de peixes, ou até mesmo de aves ou outros animais que deles se alimentem.

As macroalgas são comuns ao longo de toda a costa brasileira sendo, entretanto, mais abundantes e diversificadas em áreas com substrato rochoso e águas mais transparentes. Os principais fatores que reduzem a biodiversidade de macroalgas estão relacionados à presença de grandes aportes de água doce e sedimentos, a áreas com sedimento inconsolidado de maior mobilidade, e a zonas sujeitas a uma forte poluição orgânica. Baías protegidas em áreas urbanizadas via de regra costumam ser colonizadas por espécies de algas verdes.

Na realidade, a maior ameaça à biodiversidade de algas, bem como a biodiversidade marinha em geral, é a poluição, particularmente em áreas portuárias e em baías e enseadas com forte desenvolvimento industrial urbano. Neste sentido o caso da baía de Sepetiba é exemplar, como demonstra o trabalho [5], que será comentado mais adiante.

²Organismos que vivem no fundo de oceanos ou lagos, fixos ou não ao substrato.

³Esporos e gametas são células de reprodução, assexuada e sexuada, respectivamente.

A baía de Sepetiba é um corpo de águas salinas e salobras, comunicando-se com o oceano Atlântico por meio de duas passagens, na parte oeste, entre os cordões de ilhas que a limitam com a ponta da Restinga e, na porção leste, pelo canal que deságua na Barra de Guaratiba, o que lhe confere uma configuração quase elíptica. Ela está localizada no Estado do Rio de Janeiro, próxima à região metropolitana da cidade do Rio de Janeiro, com uma área de aproximadamente 305km². Encontra-se limitada a nordeste pela Serra do Mar, ao norte pela Serra de Madureira, a sudeste pelo Maciço da Pedra Branca e ao sul pela Restinga da Marambaia. A baía de Sepetiba tem aproximadamente 40km, de leste a oeste, e 20km, de norte a sul, com um perímetro de aproximadamente 130km. A profundidade, que não ultrapassa 10m na sua maior parte, no canal principal pode chegar a 20m. A Figura 1.1 mostra um mapa da baía de Sepetiba, retirado de [2].



Figura 1.1: A baía de Sepetiba.

A baía juntamente com suas áreas de mangue e zonas estuarinas constitui criadouro natural para as diversas espécies de moluscos, crustáceos e peixes existentes neste ambiente, sendo a atividade pesqueira importante suporte econômico e social para a região, que possui ainda indiscutível vocação natural de centro turístico.

A bacia contribuinte à baía de Sepetiba está inserida em dois conjuntos fisiográficos distintos: vertente da Serra do Mar e uma extensa área de baixada recortada por inúmeros rios e composta de 22 sub-bacias. Além das águas provenientes das sub-bacias hidrográficas, a baía recebe por transposição de bacia parte das águas do rio Paraíba do Sul que contribui significativamente para a poluição deste corpo d'água.

A baía recebe esgoto sanitário de praticamente toda a região metropolitana do Rio de Janeiro e de 12 municípios próximos. A carga orgânica produzida pela bacia de contribuição, proveniente dos esgotos domésticos é lançada praticamente sem qualquer tratamento nos rios e canais que deságuam na baía, chegando de forma mais concentrada na porção leste, na faixa litorânea proveniente de cursos d'água que drenam áreas densamente povoadas. Nos municípios do Grande Rio de Janeiro praticamente não existem sistemas coletores de esgoto sanitário implantados. Os efluentes das fossas sépticas, geralmente sem sumidouro, são lançados nas galerias de águas pluviais ou em valas e chegam aos cursos d'água, afetando a qualidade das águas, não somente dos rios e canais, mas também da baía de Sepetiba que é o receptor final de todo esse esgoto.

A baía de Sepetiba está localizada no mais importante entorno geoeconômico do Brasil, que abrange as cidades do Rio de Janeiro, São Paulo, Belo Horizonte e Vitória onde, num raio de 500km, concentram-se as maiores atividades sócio-econômicas do país. Em decorrência disto, a baía de Sepetiba tem sido receptora de rejeitos altamente tóxicos e cumulativos na cadeia alimentar, constituídos de altas concentrações de metais pesados, principalmente o zinco e o cádmio. Entre as indústrias poluidoras destaca-se a Cia Mercantil INGÁ, atualmente em situação falimentar, que tem em termos de passivo ambiental um peso considerável sobre o ecossistema da região. Seus estoques de resíduos, acumulados há mais de 30 anos no local de produção, ameaçam e fragilizam o equilíbrio ecológico da baía, sendo de responsabilidade da empresa a contaminação dos sedimentos marinhos por metais pesados. Outro contribuinte para a poluição da baía é o Porto de Itaguaí, em cuja fase de ampliação foram realizadas vultosas obras de dragagem para o aprofundamento do canal, o que significou uma intervenção altamente impactante devido ao revolvimento dos sedimentos e conseqüente remobilização de metais que estavam assentados no fundo da baía.

Atualmente, a baía de Sepetiba vem sofrendo problemas de eutrofização⁴, especialmente em pequenas enseadas, nas áreas mais próximas à linha de costa e nas áreas de influência das desembocaduras dos rios, afetada direta e significativamente, pela poluição orgânica. O crescimento de algas e a diminuição da transparência nesse corpo d'água estão associados a mudanças no índice de diversidade, começando a ocorrer uma sucessão de indivíduos que passam a dominar aqueles menos adaptados às águas poluídas.

⁴Fenômeno causado pelo excesso de nutrientes num corpo d'água, que resulta na proliferação excessiva de algas que, ao entrarem em decomposição, levam à deterioração da qualidade do corpo d'água.

A sedimentação, a turbidez e a toxicidade da água são os principais desestabilizantes entre as comunidades de macroalgas. Outros fatores que influenciam o desenvolvimento de várias espécies de macroalgas são os gradientes de salinidade e temperatura. As comunidades de macroalgas marinhas, por serem compostas de organismos sésseis⁵, sofrem efeitos de diversos elementos do meio circundante, o que as torna excelentes sensores biológicos das condições ambientais e das tendências evolutivas de seus ecossistemas. Mais detalhes sobre macroalgas e poluição podem ser encontrados em [28].

A distribuição das macroalgas é explicada pela tolerância fisiológica de cada espécie para diferentes parâmetros ambientais. Isto está bem evidenciado em [5] onde é feito um estudo da estrutura das comunidades de macroalgas na baía de Sepetiba. Neste trabalho foram realizadas amostragens em 5 pontos da baía, desde a região mais interna, sujeita diretamente aos impactos antrópicos locais, até a região próxima ao mar aberto, onde a interferência humana é reduzida, em quatro épocas do ano de 1999. A localização destes pontos pode ser vista na Figura 1.2, que foi retirada de [3]. No estudo dessas amostragens ficou evidenciado o aumento do número de espécies da região mais interna da baía em relação ao local mais próximo ao oceano. Pode-se relacionar este padrão de distribuição espacial à influência de fatores ambientais naturais e também a fatores de origem antrópica. A região mais interna da baía apresentou menores valores de salinidade e menor circulação de massas d'água se comparada com a região mais próxima ao mar aberto, situado na Ponta da Marambaia.

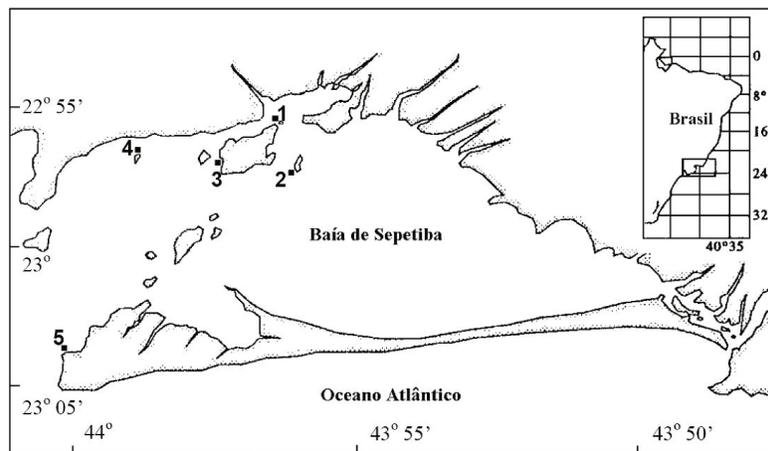


Figura 1.2: Localização dos cinco pontos de amostragens na baía de Sepetiba.

⁵Organismos que não se deslocam voluntariamente do seu local de fixação.

Em [5] os autores relatam que os locais onde as concentrações dos metais zinco e cádmio são mais elevadas (pontos 1 e 2 da Figura 1.2), são dominados pelas algas pardas *Sargassum* e *Padina*, diferentemente de outros locais sujeitos a um gradiente de poluição, como as baías de Guanabara e de Santos onde os locais mais contaminados são dominados por algas verdes oportunistas como *Ulva* e *Enteromorpha*. Este padrão encontrado na baía de Sepetiba pode ser explicado pela maior tolerância dessas algas a concentrações elevadas de metais pesados quando comparadas com algas verdes e vermelhas. Isto indica também a ausência de poluição por hidrocarbonetos em níveis que afetam processos reprodutivos de algas pardas, como foi sugerido para a baía de Guanabara. Maiores detalhes sobre algas e poluição na baía de Guanabara podem ser encontrados em [19] e sobre as comunidades de macroalgas na baía de Santos podem ser encontrados em [8].

Os resultados obtidos no trabalho [5] indicam ainda a possibilidade da introdução recente de espécies de algas na baía de Sepetiba. É importante salientar que o transporte e a introdução de espécies aquáticas, intencional ou acidental, são atualmente considerados uma das principais ameaças à biodiversidade. Uma possível explicação para este fato seria que os mecanismos de introdução, estabelecimento e invasão de uma espécie são análogos, mas possivelmente diferentes dos mecanismos de dispersão, competição e estabelecimento de espécies que ocorrem de maneira natural.

Capítulo 2

Interação entre uma Espécie de Alga e um tipo de Poluente

Este capítulo apresenta a construção gradativa de um modelo matemático, que descreve a interação entre uma espécie de macroalga e um tipo de poluente, inicialmente mais simples por conter apenas uma espécie de macroalga. Este modelo, baseado num sistema de equações diferenciais parciais, é apresentado em sua forma clássica, dita forte, e em sua forma variacional, dita fraca. A partir de sua formulação fraca, foram realizadas as discretizações espaciais e temporais. Este capítulo foi construído com o principal objetivo de mostrar os cálculos envolvidos nas discretizações de um modelo mais simples, que são totalmente análogos aos cálculos das discretizações do modelo mais complexo, que está apresentado no capítulo 3, e desta forma diminuir o volume de cálculos e mostrá-los de forma muito mais didática.

2.1 Construção do Modelo

A interação macroalga-poluente pode ser descrita por meio de um sistema de equações diferenciais parciais, onde cada equação possui como função incógnita a concentração de cada elemento envolvido nessa interação (entre as referências relacionadas a este tipo de abordagem do problema sugerimos [29] e [30]). O domínio espacial de definição dessas funções é a baía de Sepetiba, que é o cenário onde acontece essa interação evolutiva. Neste modelo inicial incluímos somente uma espécie de macroalga juntamente com um tipo de poluente, que pode ser esgoto doméstico ou lixo industrial (principais materiais impactantes do local). Neste contexto é inevitável a presença de outro elemento na interação, que são as células das quais depende a reprodução da alga.

Para cada elemento presente na interação usaremos a equação de difusão-advectação-reação (para um estudo detalhado sugerimos a consulta de [11]) cuja forma geral é, dadas adequadas condições iniciais:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\underbrace{-\alpha \nabla \mathbf{c}}_{\text{fluxo difusivo}} + \underbrace{\mathbb{V} \mathbf{c}}_{\text{fluxo advectivo}} \right) + \sigma \mathbf{c} = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}),$$

onde:

- $\mathbf{c} = \mathbf{c}(t, \mathbf{x})$: concentração em um ponto \mathbf{x} do domínio Ω no instante $t \in J$ de um dos elementos envolvidos na interação,
- α : coeficiente do fluxo difusivo,
- \mathbb{V} : vetor do fluxo advectivo,
- σ : coeficiente de decaimento do elemento,
- f : fonte do elemento, que pode depender do domínio, do tempo ou do próprio elemento.

Adotaremos um tratamento bidimensional para o domínio Ω . Isto se justifica face às dimensões geofísicas da baía de Sepetiba. A baía mede 40 km em sua extensão leste-oeste, enquanto que sua profundidade não ultrapassa 10m nas partes mais fundas.

O fluxo advectivo modela os movimentos macroscópicos do mar causados por correntes, marés e, principalmente, vento. O fluxo difusivo descreve conjuntamente os efeitos das difusões molecular e turbulenta, contabilizando o movimento irregular das partículas, que proporciona um movimento regular no todo. Intuitivamente falando, o fluxo advectivo modela o transporte voluntário como, por exemplo, os movimentos migratórios de animais, ou o transporte involuntário como sementes levadas pelo vento. O fluxo difusivo modela um fenômeno natural que é a tendência de se uniformizar as concentrações de elementos ou indivíduos em um ambiente (mais detalhes em [16] e [20]).

Apesar dos metais pesados serem poluentes bastante influentes sobre as comunidades de macroalgas da baía de Sepetiba, estes encontram-se junto ao sedimento deste corpo d'água (segundo o estudo realizado em [6]), onde o transporte advectivo é muito mais complexo do que na superfície, o que exigiria uma análise mais elaborada ou até outras ferramentas matemáticas para tratar o problema. Em razão disto, vamos nos restringir aos poluentes de superfície, como despejos orgânicos, óleos e outros. Este tipo de poluente está sujeito ao transporte advectivo da superfície, que é quase totalmente influenciado pelo vento, segundo o estudo realizado em [26]. Deste modo, o vetor \mathbb{V} irá representar apenas a corrente superficial induzida pelo vento predominante, que é o maior responsável pela circulação superficial do corpo d'água.

Sendo as macroalgas organismos sésseis, isto é, que vivem fixos ao substrato, não sofrem influência de transporte advectivo. Isto quer dizer que as macroalgas não podem ser transportadas para outros locais por correntes d'água por estarem presas ao substrato.

A influência dos poluentes sobre as macroalgas se manifesta de diferentes formas em cada espécie. Por exemplo, em lugares onde há muita poluição orgânica, as algas verdes geralmente são favorecidas. No caso da baía de Sepetiba, as algas pardas são dominantes nos locais mais próximos às desembocaduras dos rios pois, além da grande quantidade de despejos orgânicos, a baía também sofre a influência da poluição por metais pesados, aos quais as algas pardas parecem ser as mais resistentes. Com base nisso, é natural considerarmos a taxa de decaimento σ de cada espécie de macroalga do modelo como dependente da concentração de poluente, podendo ser positiva, se o poluente favorece o seu desenvolvimento, ou negativa, se o poluente desfavorece o seu desenvolvimento.

Baseando-nos no trabalho [5] que relata as principais espécies de macroalgas presentes na baía de Sepetiba, pudemos perceber que o principal processo reprodutivo dessas algas é a *metagênese*. Este processo se caracteriza pela alternância entre gerações de algas sexuadas e assexuadas, e por isso também chamado *ciclo alternante*. As algas assexuadas liberam os esporos, que são células que têm um comportamento parecido com o das sementes das plantas. Soltos pela água eles podem ou não ser depositados em substrato propício para sua germinação. As algas originadas da germinação dos esporos são sexuadas e podem produzir ou gametas masculinos ou gametas femininos. Na grande maioria das vezes, esses gametas (geralmente flagelados e por isso móveis) são liberados na água onde ocorre sua fecundação. O zigoto formado da fecundação, após aderir ao substrato, dá origem a uma nova alga assexuada. A Figura 2.1, retirada de [4], nos dá uma idéia ilustrativa desse esquema reprodutivo.

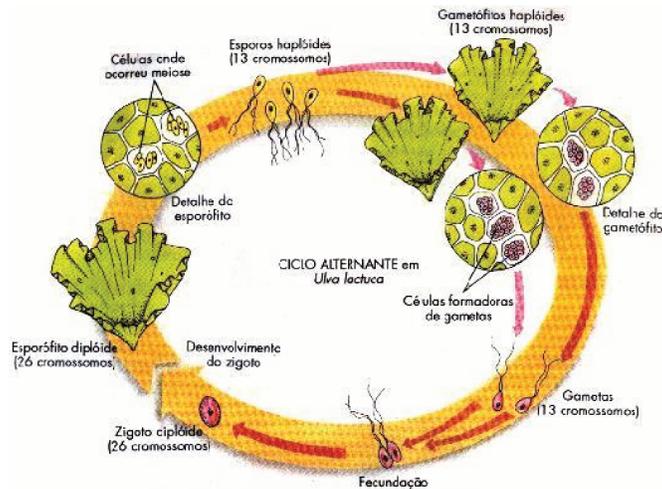


Figura 2.1: Esquema de metagênese.

Em nosso modelo, a única “fonte” de algas são os esporos e gametas, que a partir daqui chamaremos de células de reprodução. E também as próprias algas são as únicas “fontes” de células de reprodução.

Vamos considerar para as algas uma reprodução do tipo *Verhulst*, que não descreve um crescimento exponencial da população de algas de uma certa espécie, como seria a reprodução do tipo *Malthus*, mas caracteriza melhor a realidade local, em que a competição intra-específica por espaço e alimento resulta em uma eliminação natural de alguns indivíduos da espécie, o que traduz uma estabilidade no crescimento.

Sabemos que a sobrevivência das macroalgas é limitada pela penetração de luz em quantidade suficiente para manter em bom funcionamento seus processos fotossintéticos, metabólicos e reprodutivos. Em vista disso, as macroalgas não conseguem sobreviver em lugares muito profundos. Como a profundidade da baía pode chegar a 10m, não existem macroalgas em todo o substrato deste corpo d'água. Sendo assim, vamos supor que existe uma faixa em torno do continente e das ilhas onde a profundidade é propícia ao desenvolvimento das macroalgas. Fora desta faixa, tais organismos não conseguem sobreviver devido à má penetração de luz solar.

2.2 Formulação Variacional

Nesta seção pretendemos propor um modelo baseado num sistema de equações diferenciais parciais. Esta formulação inicial é chamada *formulação clássica* ou *formulação forte* do problema. Pretendemos inicialmente transformar o sistema de EDP num sistema de equações integrais, incluindo o uso do Teorema de Green. Esta nova formulação é chamada *formulação variacional* ou *formulação fraca* e exige condições menos restritivas sobre as soluções do problema do que a formulação clássica. É este é o motivo pelo qual optamos pela formulação fraca do problema.

Vamos inicialmente usar um modelo mais simples, admitindo a interação de três elementos: um poluente, uma espécie de macroalga e suas células de reprodução. Tal interação pode ser dada pelo seguinte sistema não-linear, em espaços adequadamente definidos, para $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{a} = \mathbf{a}(t, \mathbf{x})$ e $\mathbf{e} = \mathbf{e}(t, \mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} - \alpha_p \Delta \mathbf{p} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} + \sigma_p \mathbf{p} &= f(\mathbf{x}), \\ \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) + \mu_a(\mathbf{p}) \mathbf{a} &= \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\mathbf{a}}{K}\right), \\ \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} - \alpha_e \Delta \mathbf{e} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} + \sigma_e \mathbf{e} &= \lambda_e \mathbf{a}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in J = (0, T]$, e com os operadores Δ , div e ∇ apenas para as variáveis espaciais.

com condições iniciais dadas por:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{p}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{a}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{a}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{e}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{e}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega.\end{aligned}\tag{2.2}$$

As funções incógnitas do modelo (2.1) são, portanto:

$\mathbf{p}(t, \mathbf{x})$: concentração de poluente no ponto $(x, y) \in \Omega$ no instante t ,

$\mathbf{a}(t, \mathbf{x})$: concentração de algas no ponto $(x, y) \in \Omega$ no instante t ,

$\mathbf{e}(t, \mathbf{x})$: concentração de células de reprodução no ponto $(x, y) \in \Omega$ no instante t .

Os parâmetros usados em (2.1) são:

$\alpha_p \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade do poluente,

$\alpha_a(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das algas,

$\alpha_e \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das células de reprodução,

$\mathbb{V} = (U, V) \rightarrow$ vetor do transporte advectivo sobre Ω ,

$\sigma_p \rightarrow$ coeficiente de degradação do poluente,

$\mu_a(\mathbf{p}) \rightarrow$ coeficiente de decaimento das algas sob a influência de poluente,

$\sigma_e \rightarrow$ coeficiente de decaimento das células de reprodução,

$\lambda_a(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de reprodução das algas,

$\lambda_e \rightarrow$ coeficiente de reposição das células de reprodução pelas algas,

$f(\mathbf{x}) \rightarrow$ fonte pontual de poluição.

O coeficiente de decaimento das algas será considerado proporcional à concentração de poluente, isto é

$$\mu_a(\mathbf{p}) = \mu_a \mathbf{p}, \quad (2.3)$$

sendo μ_a o fator constante de proporcionalidade (por simplicidade usa-se a mesma notação).

Seja Ω_r um subconjunto do domínio Ω que representa uma faixa em torno das ilhas e do continente onde, hipoteticamente, a profundidade é propícia para o crescimento e desenvolvimento das macroalgas. Deste modo, consideraremos os coeficientes de difusibilidade $\alpha_a(\mathbf{x})$ de algas e sua taxa de crescimento $\lambda_a(\mathbf{x})$ nulos fora desta faixa, ou seja, $\alpha_a(\mathbf{x})$ e $\lambda_a(\mathbf{x}) = 0$ se $\mathbf{x} \notin \Omega_r$. Dentro da faixa, entretanto, estes parâmetros serão considerados constantes positivas dadas respectivamente por $\bar{\alpha}$ e $\bar{\lambda}$. Ou seja:

$$\alpha_a(\mathbf{x}) = \begin{cases} \bar{\alpha} & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r, \end{cases} \quad \text{e} \quad \lambda_a(\mathbf{x}) = \begin{cases} \bar{\lambda} & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r. \end{cases} \quad (2.4)$$

A Figura 2.2 representa esquematicamente a faixa Ω_r :

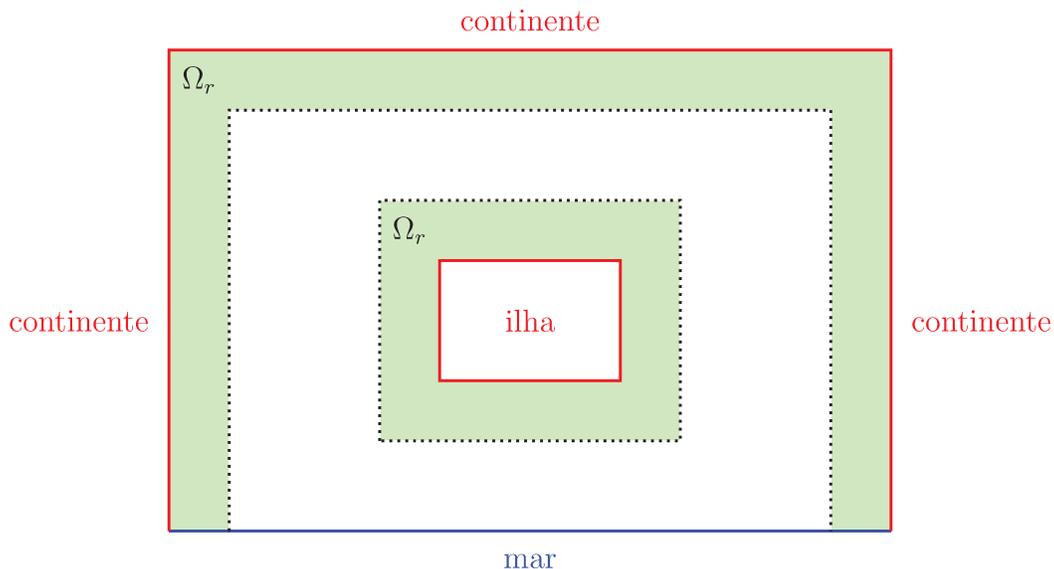


Figura 2.2: Esquema simplificado da baía (o domínio Ω) com a faixa Ω_r .

Reescrevendo o sistema (2.1) incluindo o que foi considerado em (2.3), e em espaços adequadamente definidos¹, teremos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} - \alpha_p \Delta \mathbf{p} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} + \sigma_p \mathbf{p} &= f(\mathbf{x}), \\
\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) + \mu_a \mathbf{p} \mathbf{a} &= \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\mathbf{a}}{K}\right), \\
\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} - \alpha_e \Delta \mathbf{e} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} + \sigma_e \mathbf{e} &= \lambda_e \mathbf{a}.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Consideremos as condições de contorno:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{p}|_{\Gamma_{0_p}} = \mathbf{a}|_{\Gamma_{0_a}} = \mathbf{e}|_{\Gamma_{0_e}} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_p}} = \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_a}} = \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_e}} = 0, \end{array} \right. \tag{2.6}$$

Aqui, $\Gamma_{0_I} \dot{\cup} \Gamma_{1_I} = \partial\Omega$, para I representando cada um dos elementos do modelo, isto é, \mathbf{p} , \mathbf{a} e \mathbf{e} (o símbolo $\dot{\cup}$ representa aqui uma união disjunta).

Na notação, o índice L de Γ_{L_I} representa o tipo de condição de contorno:

- $L = 0$ representa a condição de contorno de Dirichlet homogênea,
- $L = 1$ representa a condição de contorno de Von Neuman homogênea.

¹Por “adequadamente definidos” queremos indicar espaços para as 3 funções nos quais existam as operações a serem definidas na sequência, com integrais no sentido de Lebesgue e derivadas no sentido de distribuições, para a formulação variacional de (2.5) com (2.6)

Em termos de condição de contorno considera-se, por exemplo, Γ_{0_p} como a parte da fronteira $\partial\Omega$ onde se tem condição de contorno de Dirichlet homogênea com relação à concentração de poluente, ou seja, onde o poluente nunca irá chegar e, portanto, onde a concentração será sempre nula.

Consideramos também o exemplo em que Γ_{1_a} é considerado como a parte da fronteira $\partial\Omega$ onde se tem condição de contorno de Von Neuman homogênea com relação à população de algas, ou seja, onde não há passagem de algas (por exemplo, nas fronteiras de água com terra), ou onde há passagem de algas, porém a diferença entre quantidade de entrada e de saída é nula.

Podemos notar que a parte da fronteira em que ocorre determinada condição de contorno para o poluente, por exemplo, não precisa ser a mesma parte da fronteira onde valha a mesma condição para as algas ou para as células de reprodução. Ou seja, em geral não acontecem as equações $\Gamma_{0_p} = \Gamma_{0_a} = \Gamma_{0_e}$ e $\Gamma_{1_p} = \Gamma_{1_a} = \Gamma_{1_e}$.

O sistema (2.5) de equações diferenciais pode ser transformado num sistema de equações integrais, fazendo uso do clássico resultado de Dubois-Raymond. Ou seja, $\forall t \in J = (0, T]$, valem:

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} - \alpha_p \Delta \mathbf{p} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} + \sigma_p \mathbf{p} - f \right] v \, ds = 0,$$

$$\forall v \in \mathcal{V}_p = \{w \in H^1(\Omega); w|_{\Gamma_{0_p}} = 0\},$$

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) + \mu_a \mathbf{p} \mathbf{a} - \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\mathbf{a}}{K}\right) \right] v \, ds = 0, \quad (2.7)$$

$$\forall v \in \mathcal{V}_a = \{w \in H^1(\Omega); w|_{\Gamma_{0_a}} = 0\},$$

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} - \alpha_e \Delta \mathbf{e} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} + \sigma_e \mathbf{e} - \lambda_e \mathbf{a} \right] v \, ds = 0,$$

$$\forall v \in \mathcal{V}_e = \{w \in H^1(\Omega); w|_{\Gamma_{0_e}} = 0\},$$

sendo a integral no sentido de Lebesgue (para mais detalhes sugerimos [7]).

Deveremos ter ainda:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbf{p}(0, \mathbf{x}) v ds &= \int_{\Omega} \mathbf{p}_0(\mathbf{x}) v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_p, \\
\int_{\Omega} \mathbf{a}(0, \mathbf{x}) v ds &= \int_{\Omega} \mathbf{a}_0(\mathbf{x}) v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_a, \\
\int_{\Omega} \mathbf{e}(0, \mathbf{x}) v ds &= \int_{\Omega} \mathbf{e}_0(\mathbf{x}) v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_e.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Separando as integrais do sistema (2.7) em somas de integrais, teremos:

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} v ds - \int_{\Omega} \alpha_p \Delta \mathbf{p} v ds + \int_{\Omega} \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} v ds + \int_{\Omega} \sigma_p \mathbf{p} v ds = \\
&\int_{\Omega} f v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_p, \\
&\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} v ds - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) v ds + \int_{\Omega} \mu_a \mathbf{p} \mathbf{a} v ds = \\
&\int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\mathbf{a}}{K}\right) v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_a, \\
&\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} v ds - \int_{\Omega} \alpha_e \Delta \mathbf{e} v ds + \int_{\Omega} \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} v ds + \int_{\Omega} \sigma_e \mathbf{e} v ds = \\
&\int_{\Omega} \lambda_e \mathbf{a} v ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_e, \text{ todas as equações valendo para } t \in J.
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Considerando as componentes U e V do vetor \mathbb{V} como constantes, podemos re-escrever o sistema (2.9) como:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} v \, ds - \underbrace{\alpha_p \int_{\Omega} \Delta \mathbf{p} v \, ds}_{(*)} + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial x} v \, ds + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial y} v \, ds + \\
& + \sigma_p \int_{\Omega} \mathbf{p} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_p, \\
\\
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} v \, ds - \underbrace{\int_{\Omega} \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) v \, ds}_{(**)} + \mu_a \int_{\Omega} \mathbf{p} \mathbf{a} v \, ds = \\
& \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} v \, ds - \frac{1}{K} \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{a} \mathbf{e} v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_a, \tag{2.10} \\
\\
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} v \, ds - \underbrace{\alpha_e \int_{\Omega} \Delta \mathbf{e} v \, ds}_{(***)} + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial x} v \, ds + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial y} v \, ds + \\
& + \sigma_e \int_{\Omega} \mathbf{e} v \, ds = \lambda_e \int_{\Omega} \mathbf{a} v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_e.
\end{aligned}$$

Usando o teorema de Green , as parcelas (*), (**) e (***) em (2.10) podem ser escritas como segue, $\forall t \in J$:

$$\begin{aligned}
-\alpha_p \int_{\Omega} \Delta \mathbf{p} v ds &= \alpha_p \int_{\Omega} \nabla \mathbf{p} \cdot \nabla v ds - \alpha_p \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} v d\gamma, \\
-\int_{\Omega} \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) v ds &= \int_{\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a} \cdot \nabla v ds - \int_{\partial\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} v d\gamma, \\
-\alpha_e \int_{\Omega} \Delta \mathbf{e} v ds &= \alpha_e \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e} \cdot \nabla v ds - \alpha_e \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} v d\gamma,
\end{aligned} \tag{2.11}$$

onde $\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta}$ se refere à derivada normal exterior sobre a fronteira $\partial\Omega$, bem como $\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta}$ e $\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta}$.

Consideremos as integrais sobre $\partial\Omega$ presentes nas equações de (2.11). Podemos re-escrever cada uma destas como somas de integrais sobre Γ_{0_I} e Γ_{1_I} , e depois aplicar as condições de contorno pertinentes a cada subconjunto da fronteira $\partial\Omega$, da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
-\alpha_p \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} v d\gamma &= -\alpha_p \int_{\Gamma_{0_p}} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma - \alpha_p \int_{\Gamma_{1_p}} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma = 0, \\
-\int_{\partial\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} v d\gamma &= -\int_{\Gamma_{0_a}} \alpha_a(\mathbf{x}) \underbrace{\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma - \int_{\Gamma_{1_a}} \alpha_a(\mathbf{x}) \underbrace{\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma = 0, \\
-\alpha_e \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} v d\gamma &= -\alpha_e \int_{\Gamma_{0_e}} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma - \alpha_e \int_{\Gamma_{1_e}} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} v}_0 d\gamma = 0.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Tanto (2.11) quanto (2.12) valem para funções v pertencentes aos espaços de Hilbert \mathcal{V}_I (com $I = \mathbf{p}, \mathbf{a}, \mathbf{e}$).

Re-escrevendo o sistema (2.10) incluindo o que foi obtido em (2.11) pelo uso do Teorema de Green e em (2.12) pelo uso das condições de fronteira, obtemos o novo sistema, $\forall t \in J$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} v \, ds + \alpha_p \int_{\Omega} \nabla \mathbf{p} \cdot \nabla v \, ds + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial x} v \, ds + \\ & + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial y} v \, ds + \sigma_p \int_{\Omega} \mathbf{p} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_p, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} v \, ds + \int_{\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a} \cdot \nabla v \, ds + \mu_a \int_{\Omega} \mathbf{p} \mathbf{a} v \, ds = \\ & \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} v \, ds - \frac{1}{K} \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \mathbf{a} v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_a, \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} v \, ds + \alpha_e \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e} \cdot \nabla v \, ds + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial x} v \, ds + \\ & + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial y} v \, ds + \sigma_e \int_{\Omega} \mathbf{e} v \, ds = \lambda_e \int_{\Omega} \mathbf{a} v \, ds \quad \forall v \in \mathcal{V}_e. \end{aligned}$$

O sistema (2.13) juntamente com as equações de (2.8) representam a formulação fraca do nosso problema.

As soluções de (2.13) que procuramos são $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{a} = \mathbf{a}(t, \mathbf{x})$ e $\mathbf{e} = \mathbf{e}(t, \mathbf{x})$, com $\mathbf{x} \in \Omega$ e $t \in J = (0, T]$, tais que:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \in \mathcal{Q}_p &= \left\{ q \in L^2(J : H^1(\Omega)) ; \frac{\partial q}{\partial t} \in L^2(\Omega) \text{ e } q|_{\Gamma_{0p}} = 0, \forall t \in J \right\}, \\ \mathbf{a} \in \mathcal{Q}_a &= \left\{ q \in L^2(J : H^1(\Omega)) ; \frac{\partial q}{\partial t} \in L^2(\Omega) \text{ e } q|_{\Gamma_{0a}} = 0, \forall t \in J \right\}, \\ \mathbf{e} \in \mathcal{Q}_e &= \left\{ q \in L^2(J : H^1(\Omega)) ; \frac{\partial q}{\partial t} \in L^2(\Omega) \text{ e } q|_{\Gamma_{0e}} = 0, \forall t \in J \right\}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Resultados de existência e unicidade deste tipo de sistema podem ser encontrados em [17] e [21].

2.3 Discretização Espacial: Galerkin-Ritz

O método de Galerkin-Ritz consiste em construir funções \mathbf{p}_h , \mathbf{a}_h e \mathbf{e}_h que aproximam² as soluções procuradas \mathbf{p} , \mathbf{a} e \mathbf{e} contidas, respectivamente, nos espaços \mathcal{P} , \mathcal{A} e \mathcal{E} . Tais aproximações seriam da forma abaixo, recorrendo a uma separação de variáveis:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \varphi_{p_j}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{a}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \varphi_{a_j}(\mathbf{x}), \text{ e} \\ \mathbf{e}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \varphi_{e_j}(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

²Neste texto, por “aproximam” queremos indicar que $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2(\Omega)}$ é sempre pequeno $\forall t \in J$.

\mathbf{p}_h , \mathbf{a}_h e \mathbf{e}_h estão definidas, portanto, em subespaços de \mathcal{P} , \mathcal{A} e \mathcal{E} que iremos denotar por \mathcal{P}_h , \mathcal{A}_h e \mathcal{E}_h , com as φ_{p_j} , φ_{a_j} e φ_{e_j} como funções das bases de \mathcal{V}_{h_p} , \mathcal{V}_{h_a} e \mathcal{V}_{h_e} , respectivamente.

Re-escrevendo o sistema (2.13) para os novos espaços de soluções \mathcal{P}_h , \mathcal{A}_h , \mathcal{E}_h e para os novos conjuntos de funções teste, teremos o seguinte:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} v_h ds + \alpha_p \int_{\Omega} \nabla \mathbf{p}_h \cdot \nabla v_h ds + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial x} v_h ds + \\
& + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial y} v_h ds + \sigma_p \int_{\Omega} \mathbf{p}_h v_h ds = \int_{\Omega} f v_h ds \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_{h_p}, \\
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}_h}{\partial t} v_h ds + \int_{\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}_h \cdot \nabla v_h ds + \mu_a \int_{\Omega} \mathbf{p}_h \mathbf{a}_h v_h ds = \\
& \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e}_h v_h ds - \frac{1}{K} \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e}_h \mathbf{a}_h v_h ds \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_{h_a}, \\
& \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial t} v_h ds + \alpha_e \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e}_h \cdot \nabla v_h ds + U \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial x} v_h ds + \\
& + V \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial y} v_h ds + \sigma_e \int_{\Omega} \mathbf{e}_h v_h ds = \lambda_e \int_{\Omega} \mathbf{a}_h v_h ds \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_{h_e}.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Embora \mathbf{p} , \mathbf{a} e \mathbf{e} devam ser aproximados espacial e temporalmente em espaços distintos (por força, principalmente, das condições de contorno que podem ser diferentes, e de fato são) iremos, por simplicidade sobretudo de notação, definir um único espaço \mathcal{V}_h em vez de \mathcal{V}_{h_t} .

Consideremos então $\mathcal{B} = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ uma base de \mathcal{V}_h . As novas soluções que procuramos são da forma:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \varphi_j(\mathbf{x}), \\ \mathbf{a}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \varphi_j(\mathbf{x}), \\ \mathbf{e}_h(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \varphi_j(\mathbf{x}),\end{aligned}\tag{2.16}$$

em que $\mathbf{p}_j(t), \mathbf{a}_j(t), \mathbf{e}_j(t)$, para $j = 1, 2, \dots, N$, são os coeficientes das combinações lineares de (2.17).

com as condições iniciais dadas por:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{h_0}(\mathbf{x}) &= \mathbf{p}_h(0, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(0) \varphi_j(\mathbf{x}), \\ \mathbf{a}_{h_0}(\mathbf{x}) &= \mathbf{a}_h(0, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(0) \varphi_j(\mathbf{x}), \\ \mathbf{e}_{h_0}(\mathbf{x}) &= \mathbf{e}_h(0, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(0) \varphi_j(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{2.17}$$

Valem também:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial x}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}, & \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial y}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}, \\
\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{p}_j}{dt}(t) \varphi_j, \\
\frac{\partial \mathbf{a}_h}{\partial x}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}, & \frac{\partial \mathbf{a}_h}{\partial y}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}, \\
\frac{\partial \mathbf{a}_h}{\partial t}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{a}_j}{dt}(t) \varphi_j, & & (2.18) \\
\frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial x}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}, & \frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial y}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}, \\
\frac{\partial \mathbf{e}_h}{\partial t}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{e}_j}{dt}(t) \varphi_j.
\end{aligned}$$

A fim de que as três igualdades do sistema (2.15) sejam satisfeitas para todo $v_h \in \mathcal{V}_h$ é necessário e suficiente que elas aconteçam para cada φ_i da base \mathcal{B} de \mathcal{V}_h .

Re-escrevendo o sistema (2.15) incluindo os termos dados pelas igualdades em (2.17) e (2.18), teremos o seguinte:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{p}_j}{dt}(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds + \alpha_p \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)\nabla\varphi_j \right) \cdot \nabla\varphi_i ds + U \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)\frac{\partial\varphi_j}{\partial x} \right) \varphi_i ds + \\
& + V \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)\frac{\partial\varphi_j}{\partial y} \right) \varphi_i ds + \sigma_p \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds = \int_{\Omega} f \varphi_i ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
& \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{a}_j}{dt}(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds + \int_{\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)\nabla\varphi_j \right) \cdot \nabla\varphi_i ds + \\
& + \underbrace{\mu_a \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)\varphi_j \right) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{p}_k(t)\varphi_k \right) \varphi_i ds}_{(*)} = \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds - \\
& - \underbrace{\frac{1}{K} \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)\varphi_j \right) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t)\varphi_k \right) \varphi_i ds}_{(**)} \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
& \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{e}_j}{dt}(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds + \alpha_e \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)\nabla\varphi_j \right) \cdot \nabla\varphi_i ds + U \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)\frac{\partial\varphi_j}{\partial x} \right) \varphi_i ds + \\
& + V \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)\frac{\partial\varphi_j}{\partial y} \right) \varphi_i ds + \sigma_e \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds = \\
& \lambda_e \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)\varphi_j \right) \varphi_i ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

As igualdades dadas em (2.18) levam às seguintes discretizações para as condições iniciais:

$$\int_{\Omega} \mathbf{p}_{h_0}(\mathbf{x}) \varphi_i ds = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(0) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B},$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{a}_{h_0}(\mathbf{x}) \varphi_i ds = \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(0) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \quad (2.20)$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{e}_{h_0}(\mathbf{x}) \varphi_i ds = \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(0) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.$$

Os termos não-lineares indicados por (*) e (**) em (2.19) serão rearrajados da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \varphi_j \right) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \varphi_k \right) \varphi_i ds = \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j \right) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \varphi_k \varphi_i \right) ds =$$

$$\int_{\Omega} \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \varphi_k \varphi_i \right) ds = \int_{\Omega} \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j \varphi_i \right) ds = \quad (2.21)$$

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left(\int_{\Omega} \sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j \varphi_i ds \right) = \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j \varphi_i ds \right).$$

Este procedimento feito para (**) é análogo àquele para o termo indicado por (*).

Substituindo no sistema (2.19) os termos não-lineares (*) e (**) rearranjados como em (2.21), obteremos o seguinte:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{p}_j}{dt}(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds + \alpha_p \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, ds + U \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \, ds + \\
& + V \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \, ds + \sigma_p \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds = \int_{\Omega} f \varphi_i \, ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\\
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{a}_j}{dt}(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds + \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \int_{\Omega} \alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, ds + \\
& + \mu_a \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{p}_k(t) \int_{\Omega} \varphi_k \varphi_j \varphi_i \, ds \right) = \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j \varphi_i \, ds - \\
& - \frac{1}{K} \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t) \int_{\Omega} \lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j \varphi_i \, ds \right) \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \tag{2.22}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{e}_j}{dt}(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds + \alpha_e \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, ds + U \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \, ds + \\
& + V \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \, ds + \sigma_e \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds = \\
& \lambda_e \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned}$$

Usando uma notação usual para as integrais ([14], [17], [22], [24], [30]), o sistema (2.22) pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{p}_j}{dt}(t)(\varphi_j|\varphi_i) + \alpha_p \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)(\nabla\varphi_j||\nabla\varphi_i) + U \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i \right) + \\
& + V \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t) \left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i \right) + \sigma_p \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t)(\varphi_j|\varphi_i) = (f|\varphi_i) \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{a}_j}{dt}(t)(\varphi_j|\varphi_i) + \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)(\alpha_a(\mathbf{x})\nabla\varphi_j||\nabla\varphi_i) + \mu_a \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left[\sum_{k=1}^N \mathbf{p}_k(t)(\varphi_k\varphi_j|\varphi_i) \right] = \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)(\lambda_a(\mathbf{x})\varphi_j|\varphi_i) - \frac{1}{K} \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t) \left[\sum_{k=1}^N \mathbf{e}_k(t)(\lambda_a(\mathbf{x})\varphi_k\varphi_j|\varphi_i) \right] \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B},
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{d\mathbf{e}_j}{dt}(t)(\varphi_j|\varphi_i) + \alpha_e \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)(\nabla\varphi_j||\nabla\varphi_i) + U \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i \right) + \\
& + V \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t) \left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i \right) + \sigma_e \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t)(\varphi_j|\varphi_i) = \lambda_e \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t)(\varphi_j|\varphi_i) \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned}$$

Aqui, $(\nabla\varphi_j||\nabla\varphi_i) = \int_{\Omega} \nabla\varphi_j \cdot \nabla\varphi_i \, ds$.

2.4 Discretização Temporal: Diferenças Finitas

Vamos usar o método de Crank-Nicolson a fim de aproximar a solução do modelo, na formulação dada por (2.23) que se constitui, na verdade, em um sistema não-linear de Equações Diferenciais Ordinárias sobre J .

Neste esquema numérico, primeiramente vamos dividir o intervalo temporal $[0, T]$ em M subintervalos regulares de tamanho Δt , de modo que a partição uniforme resultante dessa discretização seja dada por $\{0 = t_0, t_1, t_2, \dots, t_M = T\}$. Podemos notar que $t_{n+1} - t_n = \Delta t$, para $n = 0, 1, \dots, M - 1$. O método de Crank-Nicolson consiste em se escrever o sistema (2.23) para $t = t_{n+1/2} = t_n + \Delta t/2$, utilizando no sistema resultante as seguintes aproximações:

$$\mathbf{p}_h(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{p}_h(t_n) + \mathbf{p}_h(t_{n+1})}{2}, \quad \frac{d\mathbf{p}_h}{dt}(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{p}_h(t_{n+1}) - \mathbf{p}_h(t_n)}{\Delta t},$$

$$\mathbf{a}_h(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{a}_h(t_n) + \mathbf{a}_h(t_{n+1})}{2}, \quad \frac{d\mathbf{a}_h}{dt}(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{a}_h(t_{n+1}) - \mathbf{a}_h(t_n)}{\Delta t},$$

$$\mathbf{e}_h(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{e}_h(t_n) + \mathbf{e}_h(t_{n+1})}{2}, \quad \frac{d\mathbf{e}_h}{dt}(t_n + \Delta t/2) \cong \frac{\mathbf{e}_h(t_{n+1}) - \mathbf{e}_h(t_n)}{\Delta t}.$$

O método de Crank-Nicolson é um método numérico de segunda ordem de aproximação no tempo e é numericamente estável se comparado com outros métodos numéricos de diferenças finitas (mais detalhes podem ser encontrados em [10] e [15]).

Usando as notações $\mathbf{p}_j^{(n)} = \mathbf{p}_j(t_n)$, $\mathbf{a}_j^{(n)} = \mathbf{a}_j(t_n)$, $\mathbf{e}_j^{(n)} = \mathbf{e}_j(t_n)$, o sistema (2.23) torna-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^{(n+1)} - \mathbf{p}_j^{(n)}}{\Delta t} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha_p \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^{(n+1)} + \mathbf{p}_j^{(n)}}{2} \right) (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \\
& + U \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^{(n+1)} + \mathbf{p}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right) + V \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^{(n+1)} + \mathbf{p}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right) + \\
& + \sigma_p \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^{(n+1)} + \mathbf{p}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) = (f | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\\
& \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} - \mathbf{a}_j^{(n)}}{\Delta t} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) (\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \\
& + \mu_a \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] = \\
& - \frac{1}{K} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_k^{(n+1)} + \mathbf{e}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \\
& + \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\\
& \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} - \mathbf{e}_j^{(n)}}{\Delta t} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha_e \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \\
& + U \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right) + V \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right) + \\
& + \sigma_e \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) = \lambda_e \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Evidenciando as partes lineares e não-lineares e, também, enfatizando a interdependência de \mathbf{p} , \mathbf{a} e \mathbf{e} no sistema (2.24), podemos re-escrevê-lo como a seguir:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_p \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\alpha_p \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) + \right. \\
& \left. + \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_p \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\alpha_p \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \right. \\
& \left. - \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) - \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} + \Delta t (f | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(n+1)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\Delta t}{2} (\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{\mu_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \right. \\
& \left. + \frac{\Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_k^{(n+1)} + \mathbf{e}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} = \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(n)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\Delta t}{2} (\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \frac{\mu_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] - \right. \\
& \left. - \frac{\Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_k^{(n+1)} + \mathbf{e}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} + \\
& + \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_e \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\alpha_e \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) + \right. \\
& \left. + \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} = \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_e \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\alpha_e \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \right. \\
& \left. - \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) - \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} + \\
& + \lambda_e \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

2.5 Simulação Numérica

Apresentamos a seguir um cenário obtido a partir de uma simulação numérica usando o modelo apresentado neste capítulo. Os detalhes sobre o uso do Método dos Elementos Finitos e outros detalhes necessários para o entendimento da implementação serão esclarecidos no capítulo 3. Nesta simulação numérica supomos que não há vento e que a população de macroalgas é sensível à presença do poluente. A capacidade de suporte adotada para as macroalgas foi $K = 5$ e a Figura 2.3 representa o cenário obtido após 1000 iterações temporais.

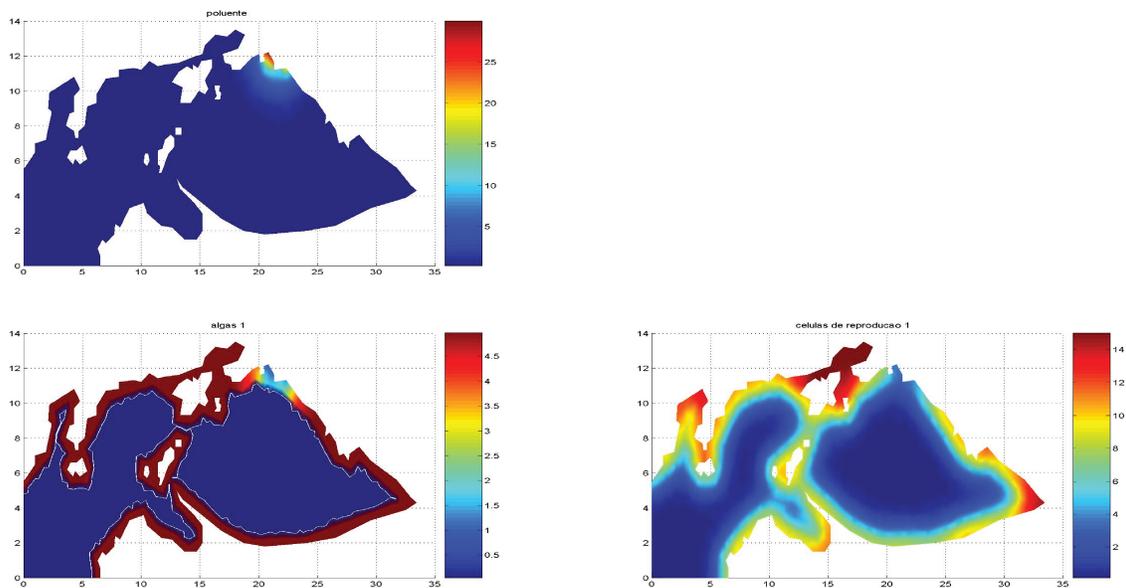


Figura 2.3: Resultado da simulação numérica.

Podemos ver claramente na Figura 2.3 a mortalidade de macroalgas onde existe poluição. Podemos notar também que a ausência de macroalgas perto das fontes poluentes e fora da faixa Ω_r implica numa certa escassez de células de reprodução nestes mesmos locais.

Neste capítulo, exploramos um problema inicial, não-linear, e sua aproximação numérica em 2 passos: via o método dos Elementos Finitos (uma forma especialmente conveniente de Ritz-Galerkin) e, em seguida, via Crank-Nicolson. O procedimento indica o caminho a ser seguido no capítulo seguinte, para uma modelagem mais completa.

Capítulo 3

Interação entre duas Espécies de Algas e um tipo de Poluente

3.1 Apresentação do Modelo

Uma das motivações deste trabalho é a de poder simular não apenas ações intra-específicas, mas incluir também o convívio de diferentes espécies, adequando o modelo de modo a se ter, também, ações interespecíficas.

Neste novo modelo pretendemos incluir mais dois elementos: uma nova espécie de macroalga e , inevitavelmente, suas células de reprodução. Diferentemente do primeiro modelo, agora teremos, além da competição por espaço e alimento entre algas da mesma espécie, a competição entre algas de espécies diferentes. Um fato interessante é que uma espécie pode prevalecer sobre a outra na competição. Além disso, a ação do poluente sobre cada uma das espécies de macroalgas pode ser contrária: o poluente pode gerar benefícios a uma espécie e malefícios a outra.

Esta situação pode ser modelada como segue:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} - \alpha_p \Delta \mathbf{p} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} + \sigma_p \mathbf{p} &= f(\mathbf{x}), \\ \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) + \mu_a(\mathbf{p}) \mathbf{a} &= \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\beta_{aa} \mathbf{a} + \beta_{ab} \mathbf{b}}{K}\right) - \gamma_a \mathbf{a} \mathbf{b}, \\ \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_b(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{b}) + \mu_b(\mathbf{p}) \mathbf{b} &= \lambda_b(\mathbf{x}) \mathbf{g} \left(1 - \frac{\beta_{ba} \mathbf{a} + \beta_{bb} \mathbf{b}}{K}\right) - \gamma_b \mathbf{a} \mathbf{b}, \\ \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} - \alpha_e \Delta \mathbf{e} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} + \sigma_e \mathbf{e} &= \lambda_e \mathbf{a}, \\ \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} - \alpha_g \Delta \mathbf{g} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{g} + \sigma_g \mathbf{g} &= \lambda_g \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, t \in J,\end{aligned}\tag{3.1}$$

com condições iniciais dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{p}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{a}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{a}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{b}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{b}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{e}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{e}_0(\mathbf{x}), \\ \mathbf{g}(0, \mathbf{x}) &= \mathbf{g}_0(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{3.2}$$

e condições de contorno definidas mais adiante.

Pode-se observar que esta estratégia combina características de dinâmica populacional dependente da densidade, ações interespecíficas de tipo *Lotka-Volterra* e processos de dispersão e transporte clássicos (para mais detalhes sugerimos [11] e [30]).

As funções incógnitas do modelo (3.1) são, portanto:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(t, \mathbf{x}) &\Rightarrow \text{concentração de poluente,} \\ \mathbf{a}(t, \mathbf{x}) &\Rightarrow \text{concentração de algas da espécie 1,} \\ \mathbf{b}(t, \mathbf{x}) &\Rightarrow \text{concentração de algas da espécie 2,} \\ \mathbf{e}(t, \mathbf{x}) &\Rightarrow \text{concentração de células de reprodução das algas da espécie 1,} \\ \mathbf{g}(t, \mathbf{x}) &\Rightarrow \text{concentração de células de reprodução das algas da espécie 2,} \end{aligned}$$

sempre para $\mathbf{x} \in \Omega$ e $t \in J = (0, T]$.

Os parâmetros do modelo (3.1) estão apresentados a seguir:

$\alpha_p \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade do poluente,

$\alpha_a(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das algas da espécie 1,

$\alpha_b(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das algas da espécie 2,

$\alpha_e \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das células de reprodução das algas da espécie 1,

$\alpha_g \rightarrow$ coeficiente de difusibilidade das células de reprodução das algas da espécie 2,

$\mathbb{V} = (U, V) \rightarrow$ vetor do transporte advectivo sobre Ω ,

$\sigma_p \rightarrow$ coeficiente de decaimento do poluente,

$\mu_a(\mathbf{p}) \rightarrow$ coeficiente de decaimento das algas da espécie 1 sob a influência de poluente,

$\mu_b(\mathbf{p}) \rightarrow$ coeficiente de decaimento das algas da espécie 2 sob a influência de poluente,

$\sigma_e \rightarrow$ coeficiente de decaimento das células de reprodução das algas da espécie 1,

$\sigma_g \rightarrow$ coeficiente de decaimento das células de reprodução das algas da espécie 2,

$\lambda_a(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de reprodução das algas da espécie 1,

$\lambda_b(\mathbf{x}) \rightarrow$ coeficiente de reprodução das algas da espécie 2,

$\lambda_e \rightarrow$ coeficiente de reposição das células de reprodução pelas algas da espécie 1,

$\lambda_g \rightarrow$ coeficiente de reposição das células de reprodução pelas algas da espécie 2,

γ_a e $\gamma_b \rightarrow$ coeficientes de relação interespecífica (competição),

$\beta_{aa}, \beta_{ab}, \beta_{ba}$ e $\beta_{bb} \rightarrow$ coeficientes de adequação da capacidade de suporte (para maiores detalhes sugerimos [23]),

$f(\mathbf{x}) \rightarrow$ fonte pontual de poluição.

Os coeficientes de decaimento das algas serão considerados como funções lineares de \mathbf{p} , dados a seguir:

$$\mu_a(\mathbf{p}) = \mu_a \mathbf{p} \quad \text{e} \quad \mu_b(\mathbf{p}) = \mu_b \mathbf{p} \quad (3.3)$$

sendo μ_a e μ_b as constantes de proporcionalidade (por simplicidade usaremos a mesma notação).

Analogamente ao que foi feito no primeiro modelo, vamos definir os parâmetros de difusibilidade e taxa de crescimento como a seguir:

$$\begin{aligned} \alpha_a(\mathbf{x}) &= \begin{cases} \bar{\alpha}_a & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r, \end{cases} \\ \alpha_b(\mathbf{x}) &= \begin{cases} \bar{\alpha}_b & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r, \end{cases} \\ \lambda_a(\mathbf{x}) &= \begin{cases} \bar{\lambda}_a & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r, \end{cases} \\ \lambda_b(\mathbf{x}) &= \begin{cases} \bar{\lambda}_b & , \text{ se } \mathbf{x} \in \Omega_r \text{ e} \\ 0 & , \text{ se } \mathbf{x} \notin \Omega_r. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde σ_a , $\bar{\alpha}_a$, $\bar{\alpha}_b$, $\bar{\lambda}_a$ e $\bar{\lambda}_b$ são constantes positivas. Estes valores indicam que algas só se difundem em determinada região (Ω_r) e, portanto, só se reproduzem aí. Um esquema desta faixa $\Omega_r \subset \Omega$ pode ser visto na Figura 2.2.

3.2 O Modelo Discretizado

Vamos re-escrever o sistema (3.1), incluindo as definições dadas em (3.3), como a seguir:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} - \alpha_p \Delta \mathbf{p} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{p} + \sigma_p \mathbf{p} &= f(\mathbf{x}), \\
\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{a}) + \mu_a \mathbf{p} \mathbf{a} &= \lambda_a(\mathbf{x}) \mathbf{e} \left(1 - \frac{\beta_{aa} \mathbf{a} + \beta_{ab} \mathbf{b}}{K} \right) - \gamma_a \mathbf{a} \mathbf{b}, \\
\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_b(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{b}) + \mu_b \mathbf{p} \mathbf{b} &= \lambda_b(\mathbf{x}) \mathbf{g} \left(1 - \frac{\beta_{ba} \mathbf{a} + \beta_{bb} \mathbf{b}}{K} \right) - \gamma_b \mathbf{a} \mathbf{b}, \\
\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} - \alpha_e \Delta \mathbf{e} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{e} + \sigma_e \mathbf{e} &= \lambda_e \mathbf{a}, \\
\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} - \alpha_g \Delta \mathbf{g} + \mathbb{V} \cdot \nabla \mathbf{g} + \sigma_g \mathbf{g} &= \lambda_g \mathbf{b}.
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Consideremos as condições de contorno:

$$\begin{cases} \mathbf{p}|_{\Gamma_{0_p}} = \mathbf{a}|_{\Gamma_{0_a}} = \mathbf{b}|_{\Gamma_{0_b}} = \mathbf{e}|_{\Gamma_{0_e}} = \mathbf{g}|_{\Gamma_{0_g}} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_p}} = \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_a}} = \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_b}} = \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_e}} = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{1_g}} = 0. \end{cases} \tag{3.6}$$

Aqui $\Gamma_{0_I} \dot{\cup} \Gamma_{1_I} = \partial \Omega$, para I representando cada um dos elementos da interação, isto é, $\mathbf{p}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{e}, \mathbf{g}$ (o símbolo $\dot{\cup}$ representa união disjunta).

O índice L de Γ_{L_I} representa o tipo de condição de contorno:

- $L = 0$ representa a condição de contorno de Dirichlet homogênea,
- $L = 1$ representa a condição de contorno de Von Neuman homogênea.

O índice I representa cada um dos elementos da interação, a saber $\mathbf{p}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{e}$ e \mathbf{g} .

Notemos que uma condição de contorno de Robin não foi considerada para população alguma. A explicação para isto é que a parte de $\partial\Omega$ que não representa fronteira de água com terra (onde a condição de contorno considerada é a de Von Neuman homogênea), representa fronteira de mar aberto, através da qual a diferença entre quantidade de entrada e de saída de cada elemento é nula.

Este fato é bastante razoável se notarmos que tais fronteiras de mar aberto estão longe o bastante das principais fontes poluentes (localizadas próximas ao Porto de Itaguaí e nas desembocaduras dos rios). Além disso, vamos considerar que as algas da baía de Sepetiba começam a tornar-se menos densas em regiões menos protegidas da ação das ondas, pois isto acontece para uma espécie de alga muito abundante em determinados locais da baía, a *Sargassum*. Esta afirmação é baseada no trabalho [25], em que os autores estudaram as comunidades de *Sargassum* do litoral do RJ e SP, confirmada pelo trabalho [5] para as comunidades de *Sargassum* da baía de Sepetiba. Isto é, comunidades de *Sargassum* ocorrem em razoável quantidade em regiões de modo protegido (interiores de baías) e em pequena quantidade em regiões moderadamente protegidas (locais da baía próximos ao mar aberto), segundo os padrões estabelecidos pelos autores de [25].

Em consequência do que foi comentado, a densidade de esporos e gametas das algas da baía de Sepetiba será menor em regiões onde a população de algas for menos densa, pois as algas são as únicas fontes de tais células de reprodução.

Baseando-nos nessas informações, consideraremos que, nas fronteiras de mar aberto, a densidade de todos os elementos envolvidos na interação (poluente, algas e células de reprodução) será considerada nula, e portanto, o balanço entre entrada e saída de cada elemento através das fronteiras de mar aberto será nulo também. Assim, condições de contorno mais razoáveis a serem adotadas no modelo são as condições de Dirichlet homogênea e de Von Neuman homogênea.

A formulação variacional seguida das discretizações do sistema seguem passos análogos aos que fizemos para o sistema do primeiro modelo. Por este motivo, explicitaremos apenas as equações discretizadas finais do sistema não-linear de EDP (3.5), obtidas com dois passos de aproximação: aquele por Elementos Finitos na discretização espacial e outro por Crank-Nicolson no tempo.

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_p \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\alpha_p \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) + \right. \\
& \left. + \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_p \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\alpha_p \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \right. \\
& \left. - \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) - \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} + \Delta t (f | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B},
\end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(n+1)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\Delta t}{2} (\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{\mu_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \right. \\
& \left. + \frac{\beta_{aa} \Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_k^{(n+1)} + \mathbf{e}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \frac{\gamma_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{b}_k^{(n+1)} + \mathbf{b}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} = \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(n)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\Delta t}{2} (\alpha_a(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \frac{\mu_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] - \right. \\
& \left. - \frac{\beta_{aa} \Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_k^{(n+1)} + \mathbf{e}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] - \frac{\gamma_a \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{b}_k^{(n+1)} + \mathbf{b}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} + \\
& + \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_j | \varphi_i) - \frac{\beta_{ab} \Delta t}{K} \left[\sum_{j,k=1}^N \left(\frac{\mathbf{e}_j^{(n+1)} + \mathbf{e}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\mathbf{b}_k^{(n+1)} + \mathbf{b}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_a(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right],
\end{aligned} \tag{3.8}$$

$\forall \varphi_i \in \mathcal{B}$,

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{b}_j^{(n+1)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\Delta t}{2} (\alpha_b(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{\mu_b \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \right. \\
& \left. + \frac{\beta_{ba} \Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{g}_k^{(n+1)} + \mathbf{g}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_b(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] + \frac{\gamma_b \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_k^{(n+1)} + \mathbf{a}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} = \\
& \sum_{j=1}^N \mathbf{b}_j^{(n)} \left\{ (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\Delta t}{2} (\alpha_b(\mathbf{x}) \nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \frac{\mu_b \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_k^{(n+1)} + \mathbf{p}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] - \right. \\
& \left. - \frac{\beta_{ba} \Delta t}{2K} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{g}_k^{(n+1)} + \mathbf{g}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_b(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] - \frac{\gamma_b \Delta t}{2} \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_k^{(n+1)} + \mathbf{a}_k^{(n)}}{2} \right) (\varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right] \right\} + \\
& + \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{g}_j^{(n+1)} + \mathbf{g}_j^{(n)}}{2} \right) (\lambda_b(\mathbf{x}) \varphi_j | \varphi_i) - \frac{\beta_{bb} \Delta t}{K} \left[\sum_{j,k=1}^N \left(\frac{\mathbf{g}_j^{(n+1)} + \mathbf{g}_j^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{\mathbf{a}_k^{(n+1)} + \mathbf{a}_k^{(n)}}{2} \right) (\lambda_b(\mathbf{x}) \varphi_k \varphi_j | \varphi_i) \right],
\end{aligned} \tag{3.9}$$

$\forall \varphi_i \in \mathcal{B}$,

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_e \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\alpha_e \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) + \right. \\
& \left. + \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} = \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_e \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\alpha_e \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \right. \\
& \left. - \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) - \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} + \lambda_e \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{a}_j^{(n+1)} + \mathbf{a}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B},
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \mathbf{g}_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_g \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \frac{\alpha_g \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) + \right. \\
& \left. + \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} = \sum_{j=1}^N \mathbf{g}_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_g \Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \frac{\alpha_g \Delta t}{2} (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) - \right. \\
& \left. - \frac{U \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dx} \middle| \varphi_i \right) - \frac{V \Delta t}{2} \left(\frac{d\varphi_j}{dy} \middle| \varphi_i \right) \right\} + \lambda_g \Delta t \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{b}_j^{(n+1)} + \mathbf{b}_j^{(n)}}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

com condições iniciais e de contorno definidas anteriormente. Aqui $n = 1, 2, \dots, M$ e $\mathcal{B} = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N\}$ é uma base para o espaço de funções teste \mathcal{V}_h . As condições iniciais discretizadas são dadas a seguir:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbf{p}_0(\mathbf{x}) \varphi_i \, ds &\cong \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(0)} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds, \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\int_{\Omega} \mathbf{a}_0(\mathbf{x}) \varphi_i \, ds &\cong \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(0)} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds, \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\int_{\Omega} \mathbf{b}_0(\mathbf{x}) \varphi_i \, ds &\cong \sum_{j=1}^N \mathbf{b}_j^{(0)} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds, \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\int_{\Omega} \mathbf{e}_0(\mathbf{x}) \varphi_i \, ds &\cong \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(0)} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds, \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}, \\
\int_{\Omega} \mathbf{g}_0(\mathbf{x}) \varphi_i \, ds &\cong \sum_{j=1}^N \mathbf{g}_j^{(0)} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, ds, \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

As principais fontes poluentes na baía de Sepetiba são os rios e canais que deságuam nesta baía. Em função das dimensões envolvidas, podemos considerar as desembocaduras dos rios como fontes pontuais do nosso problema. Modelando cada fonte pontual por um delta de *Dirac*, a fonte pode ser modelada como soma de fontes pontuais, isto é, como soma de deltas de *Dirac*:

$$f(\mathbf{x}) = f_1 \delta_{P_1}(\mathbf{x}) + f_2 \delta_{P_2}(\mathbf{x}) + f_3 \delta_{P_3}(\mathbf{x}), \text{ para } x \in \Omega,$$

onde P_1, P_2, P_3 denotam os pontos de localização das desembocaduras dos três principais rios poluentes da baía de Sepetiba, de intensidades, respectivamente, f_1, f_2 e f_3 .

Considerando uma discretização espacial para Ω_h , as coordenadas dos pontos P_1, P_2, P_3 podem ser aproximadas pelos valores das respectivas coordenadas de nós que irão compor a discretização espacial. Consideremos as coordenadas desses nós dadas por $\mathbf{x}_{j_1}, \mathbf{x}_{j_2}$ e \mathbf{x}_{j_3} .

Assim, para f_1, f_2 e f_3 constantes:

$$\begin{aligned} (f|\varphi_i) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) ds = \\ &f_1 \int_{\Omega} \delta_{P_1}(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) ds + f_2 \int_{\Omega} \delta_{P_2}(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) ds + f_3 \int_{\Omega} \delta_{P_3}(\mathbf{x})\varphi_i(\mathbf{x}) ds \cong \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$f_1 \varphi_i(\mathbf{x}_{j_1}) + f_2 \varphi_i(\mathbf{x}_{j_2}) + f_3 \varphi_i(\mathbf{x}_{j_3}), \quad \forall \varphi_i \in \mathcal{B}.$$

3.3 Método dos Elementos Finitos

O domínio bidimensional Ω representa o local onde ocorrem as interações do problema. Nosso objetivo inicial consiste em obter o contorno de Ω a partir de uma imagem satelitária da baía de Sepetiba, como a da figura (1.1). Devido à grande irregularidade geométrica do contorno da baía, com vistas ao uso de aproximar o contorno com poligonais, aproximamos o contorno do domínio Ω , bem como o contorno da faixa Ω_r , por trechos de retas, formando um novo domínio que chamamos de Ω_h . De modo intuitivo podemos notar que, à medida que refinamos a malha poligonal de Ω_h , o novo domínio se aproxima cada vez mais do domínio original Ω .

Com a ajuda de software¹ adequado, obtivemos um contorno poligonal que aproxima o domínio original Ω . Segue a Figura 3.1 com o novo domínio Ω_h , bem como o contorno da faixa Ω_r :

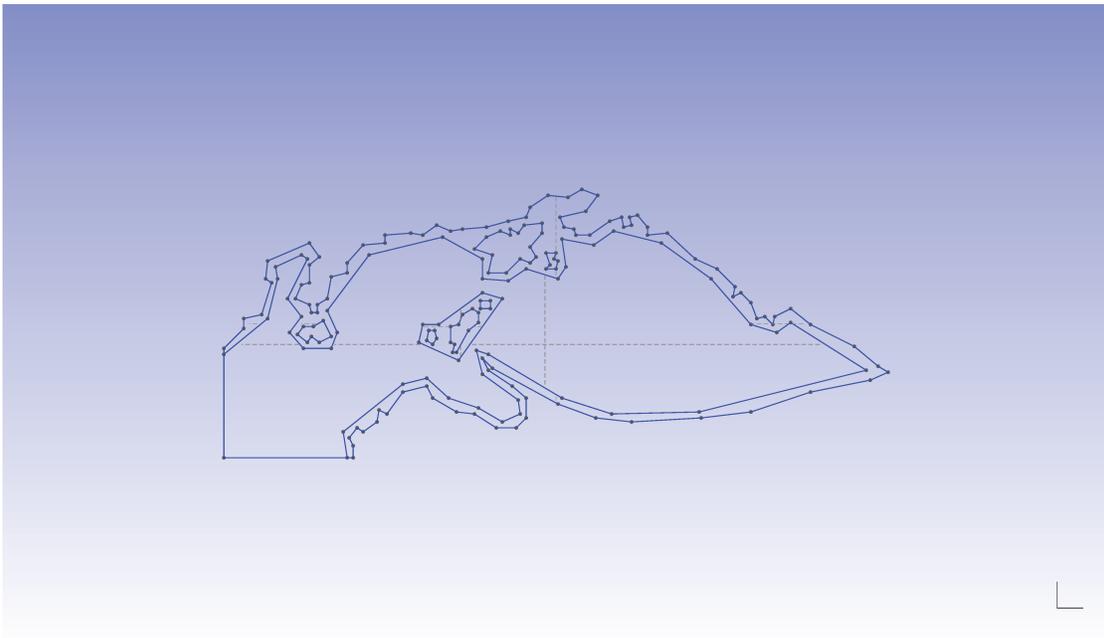


Figura 3.1: O domínio Ω_h e a faixa Ω_r .

Na construção de Ω_h , foram consideradas somente as maiores ilhas da baía de Sepetiba, sendo que algumas ilhas muito próximas foram mescladas e outras ilhas de dimensões desinteressantes para a análise do nosso problema foram desprezadas.

¹O software utilizado foi o *Gmsh*, que é gratuito.

Para a discretização de Ω_h , usamos os elementos triangulares, em que os nós são os próprios vértices dos elementos. Ainda com a ajuda do mesmo software, pudemos obter uma triangulação (à qual chamamos \mathcal{T}_h) para o domínio Ω_h com 3044 triângulos e 1652 nós, que está apresentada na Figura 3.2:

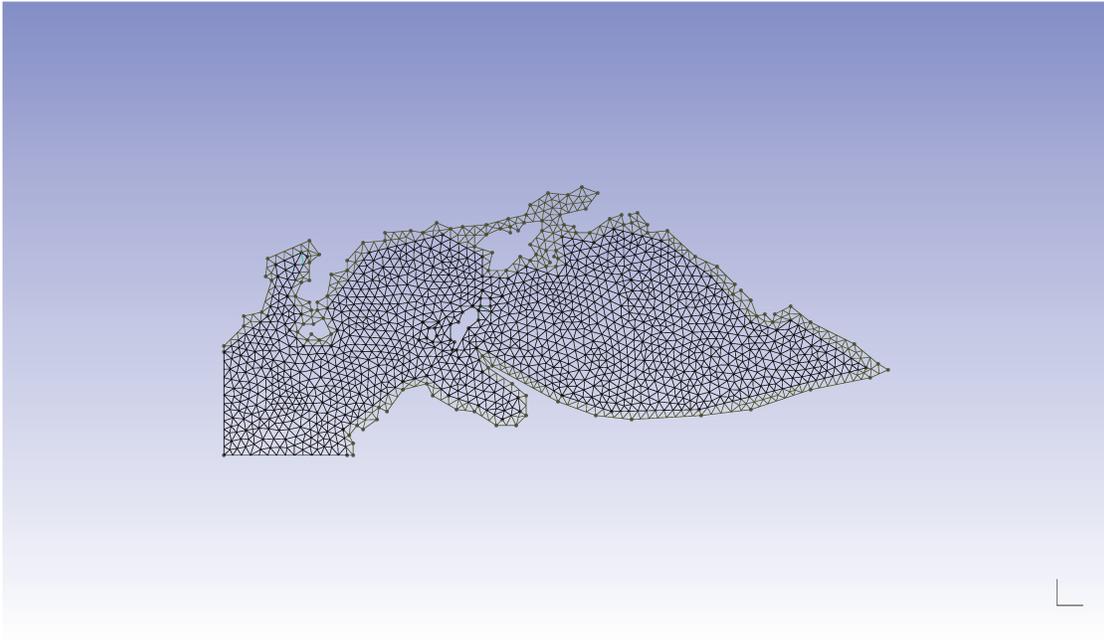


Figura 3.2: O domínio Ω discretizado.

A discretização realizada anteriormente, via separação de variáveis espacial e temporal e a opção por aproximações espaciais num subespaço de dimensão finita do espaço adequadamente definido e, ainda, com aproximações temporais via Crank-Nicolson, indicam como esta seção preconiza o uso do método de Galerkin-Ritz, com vistas ao uso do método de Elementos Finitos. Para isso, foram definidos espaços vetoriais e subespaços de dimensão finita que aproximam o espaço das funções incógnitas.

- Representemos por N o número total de nós e por NT o número total de triângulos da triangulação² \mathcal{T}_h de Ω_h .
- Denotemos por \mathbf{x}_i , $i = 1, 2, \dots, N$ as coordenadas de cada nó sobre Ω_h e por T_k , $k = 1, 2, \dots, NT$ os triângulos da triangulação \mathcal{T}_h .
- Consideremos o conjunto $\mathcal{S} = \{v \in C^0(\Omega_h) ; v|_{T_k} \text{ é um polinômio linear } \}$. Em outras palavras, \mathcal{S} é o conjunto das funções contínuas sobre Ω_h , e planas sobre cada triângulo. Intuitivamente falando, são funções cujos gráficos parecem uma superfície escamosa sobre Ω_h , com escamas triangulares planas.
- Podemos considerar este conjunto \mathcal{S} como tendo por base $\mathcal{B} = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$, com cada φ_i linear sobre cada $T_k \in \mathcal{T}_h$ e $\varphi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$. Em outras palavras, cada φ_i representa uma função que vale 1 no nó \mathbf{x}_i e vale zero em todos os demais nós sobre Ω_h , e como cada $\varphi_i \in \mathcal{S}$ é um plano sobre cada triângulo T_k em Ω_h , podemos descrever cada φ_i como uma função cujo gráfico tem o aspecto de uma pirâmide, cujo topo se encontra acima do nó \mathbf{x}_i com altura unitária, e cuja base é formada pela união de todos os triângulos que possuem \mathbf{x}_i como vértice. A Figura 3.3 ilustra essa idéia:

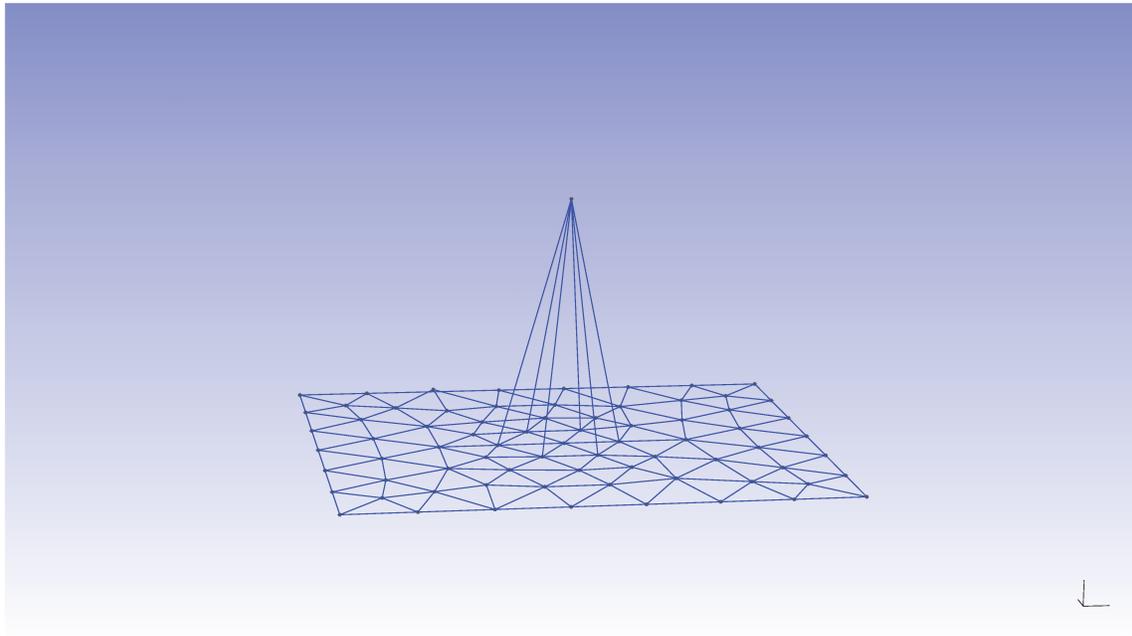


Figura 3.3: Representação de uma função φ_i .

²Esta triangulação, para uma conveniente aproximação pelo método dos Elementos Finitos, deve satisfazer a algumas exigências de regularidade bastante simples. Para mais detalhes sugerimos [12] e [18].

Proposição 3.1 Fixada a triangulação³ $\mathcal{T}_h = \{T_k\}_{k=1,2,\dots,NT}$ sobre Ω_h com N nós e NT triângulos, o conjunto $\mathcal{B} = \{\varphi_i\}_{i=1,2,\dots,N}$ é uma base do espaço vetorial \mathcal{S} e, portanto, \mathcal{S} é um espaço vetorial de dimensão N .

Dem.: É trivial observar que \mathcal{S} é um espaço vetorial. Precisamos agora provar que \mathcal{B} é LI e que gera o espaço vetorial \mathcal{S} , isto é, que \mathcal{B} é uma base para \mathcal{S} .

Considere uma combinação linear nula dos elementos de \mathcal{B} :

$$a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + \dots + a_N\varphi_N = 0.$$

Vamos supor por absurdo e sem perda de generalidade que $a_1 \neq 0$. Então,

$$\varphi_1 = \frac{a_2}{a_1}\varphi_2 + \frac{a_3}{a_1}\varphi_3 + \dots + \frac{a_N}{a_1}\varphi_N \implies$$

$$\varphi_1(\mathbf{x}_1) = \frac{a_2}{a_1}\varphi_2(\mathbf{x}_1) + \frac{a_3}{a_1}\varphi_3(\mathbf{x}_1) + \dots + \frac{a_N}{a_1}\varphi_N(\mathbf{x}_1) = 0,$$

já que $\varphi_i(\mathbf{x}_j) = 0$ sempre que $i \neq j$. Isto é um absurdo, visto que $\varphi_1(\mathbf{x}_1) = 1$. Portanto, $a_i = 0$, $\forall i = 1, 2, \dots, N$.

Com isso fica provado que \mathcal{B} é um conjunto LI.

Agora consideremos $v \in \mathcal{S}$. Consideremos também a função w dada por:

$$w = v(\mathbf{x}_1)\varphi_1 + v(\mathbf{x}_2)\varphi_2 + \dots + v(\mathbf{x}_N)\varphi_N.$$

Podemos ver que os valores de v e w são iguais em cada nó \mathbf{x}_i para $i = 1, 2, \dots, N$, ou seja, são iguais para cada \mathbf{x}_i da malha que compõe \mathcal{T}_h , pois,

$$w(\mathbf{x}_i) = v(\mathbf{x}_1)\varphi_1(\mathbf{x}_i) + v(\mathbf{x}_2)\varphi_2(\mathbf{x}_i) + \dots + v(\mathbf{x}_N)\varphi_N(\mathbf{x}_i) =$$

$$v(\mathbf{x}_i)\varphi_i(\mathbf{x}_i) = v(\mathbf{x}_i).$$

Considere um triângulo qualquer T_k da triangulação \mathcal{T}_h .

Sabemos que v e w são funções lineares sobre T_k . A primeira porque pertence a \mathcal{S} , e por definição de \mathcal{S} seus elementos são lineares sobre cada triângulo de \mathcal{T}_h . A segunda porque é combinação linear de funções que são lineares sobre cada triângulo de \mathcal{T}_h .

Sabemos que v e w possuem valores iguais nos três nós que são os vértices de T_k .

Como 3 pontos definem um único plano, concluímos que $v|_{T_k} = w|_{T_k}$.

Como T_k é um triângulo genérico de \mathcal{T}_h , concluímos que $v|_{T_k} = w|_{T_k} \forall T_k \in \mathcal{T}_h$, e logo, sobre todo o Ω_h . Então $v \equiv w$ sobre Ω_h .

Com isso fica provado que \mathcal{B} gera \mathcal{S} .

Portanto, \mathcal{B} é uma base de \mathcal{S} e, conseqüentemente, \mathcal{S} é um espaço vetorial de dimensão N . ■

³Esta proposição vale para qualquer triangulação de Ω_h fixada, que satisfaça a certas exigências de regularidade ([12] e [18]).

Vale a pena fazer algumas observações introdutórias sobre os sucessivos passos da implementação:

- Na formulação fraca do modelo (que foi omitida neste capítulo mas que é análoga à formulação fraca explicitada em (2.13) para o modelo do capítulo anterior), procuramos por funções incógnitas $\mathbf{p}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{a}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{b}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{e}(t, \mathbf{x})$ e $\mathbf{g}(t, \mathbf{x})$, sujeitas às condições iniciais e de contorno já apresentadas e pertencentes aos espaços:

$$\mathcal{Q}_I = \left\{ q \in L^2(J; H^1(\Omega)) ; \frac{\partial q}{\partial t} \in L^2(\Omega) \text{ e } q|_{\Gamma_{0I}} = 0, \forall t \in J \right\},$$

para I representando \mathbf{p} , \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{e} e \mathbf{g} , respectivamente.

- Depois da discretização espacial feita com o auxílio dos métodos de Galerkin-Ritz e Elementos Finitos, da discretização temporal feita com o auxílio do método de Crank-Nicolson e da aproximação do domínio Ω pelo novo domínio Ω_h , passamos a procurar funções $\mathbf{p}_h(t_n, \mathbf{x})$, $\mathbf{a}_h(t_n, \mathbf{x})$, $\mathbf{b}_h(t_n, \mathbf{x})$, $\mathbf{e}_h(t_n, \mathbf{x})$ e $\mathbf{g}_h(t_n, \mathbf{x})$ dadas pelas aproximações:

$$\mathbf{p}_h(t_n, \mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j(t_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^{(n)} \varphi_j(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{a}_h(t_n, \mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j(t_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j^{(n)} \varphi_j(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{b}_h(t_n, \mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{b}_j(t_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{b}_j^{(n)} \varphi_j(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{e}_h(t_n, \mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j(t_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{e}_j^{(n)} \varphi_j(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{g}_h(t_n, \mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{g}_j(t_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \cong \sum_{j=1}^N \mathbf{g}_j^{(n)} \varphi_j(\mathbf{x}),$$

$\forall n = 1, 2, \dots, M$, aproximações estas pertencentes ao conjunto:

$$\mathcal{S} = \{v \in C^0(\Omega_h); v|_{T_k} \text{ é um polinômio linear}\}.$$

- Em outras palavras, procuramos novas funções \mathbf{p}_h , \mathbf{a}_h , \mathbf{b}_h , \mathbf{e}_h e \mathbf{g}_h , sobre o novo domínio Ω_h , que coincidem (aproximadamente) com as funções incógnitas originais apenas nos N nós da triangulação \mathcal{T}_h , isto é, nos pontos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$, sendo que sobre os triângulos T_1, T_2, \dots, T_{NT} elas são lineares. Esta procura construtiva se realiza de forma que, conhecendo os valores das funções em todos os N nós \mathbf{x}_j no instante n , obtemos os valores das funções em todos os N nós \mathbf{x}_j no instante $n + 1$.
- Podemos notar que o sistema discretizado dado por (3.7), (3.8), (3.9), (3.10) e (3.11), constitui-se de cinco equações, das quais duas ((3.8) e (3.9)) são não-lineares. E podemos mencionar também, que a procura por cinco funções que resolvem (3.5) transformou-se, nos sucessivos passos de aproximações espaciais e temporais, no cálculo de cinco vetores em cada passo no tempo.

No esquema numérico, haverá uma mudança de ordem nos cálculos que, em muitos casos, facilita as posteriores resoluções e a obtenção de soluções aproximadas dos sistemas não-lineares. Realizaremos tais cálculos seguindo o caminho apresentado em [30], adaptado ao presente estudo.

Conhecemos inicialmente os vetores $\mathbf{p}^{(0)}$, $\mathbf{a}^{(0)}$, $\mathbf{b}^{(0)}$, $\mathbf{e}^{(0)}$ e $\mathbf{g}^{(0)}$ que são dados pela condição inicial discretizada, e que se referem aos valores em cada um dos N nós \mathbf{x}_j das funções \mathbf{p} , \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{e} e \mathbf{g} no instante $t = 0$.

O primeiro sistema, referente ao poluente, é linear e dado por:

$$\mathbb{A}_1 \mathbf{p}^{(1)} = \mathbb{B}_1 \mathbf{p}^{(0)} + \mathbf{b}_1.$$

Deste modo, podemos calcular $\mathbf{p}^{(1)}$ diretamente, resolvendo o sistema linear acima. O segundo sistema é não-linear e dado por:

$$\mathbb{A}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{e}^{(1)}) \mathbf{a}^{(1)} = \mathbb{B}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{e}^{(1)}) \mathbf{a}^{(0)} + \mathbf{b}_2(\mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{e}^{(1)}).$$

Na impossibilidade de calcular este sistema, visto que não possuímos os vetores $\mathbf{e}^{(1)}$ e $\mathbf{b}^{(1)}$, vamos fazer as seguintes aproximações iniciais:

no lugar de $\mathbf{e}^{(1)}$ inicialmente $\mathbf{e}^{(0)}$,

no lugar de $\mathbf{b}^{(1)}$ inicialmente $\mathbf{b}^{(0)}$.

Seguindo esta idéia inicial, apresentamos a seguir o algoritmo de resolução desse problema:

1. A partir das aproximações iniciais, resolvemos o segundo sistema

$$\mathbb{A}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)})\mathbf{a}^{(*)} = \mathbb{B}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)})\mathbf{a}^{(0)} + \mathbf{b}_2(\mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}),$$

obtendo $\mathbf{a}^{(*)}$.

2. Resolvemos o terceiro sistema adotando $\mathbf{g}^{(0)}$ como uma aproximação inicial para $\mathbf{g}^{(1)}$:

$$\mathbb{A}_3(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{a}^{(*)}, \mathbf{g}^{(0)})\mathbf{b}^{(*)} = \mathbb{B}_3(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{a}^{(*)}, \mathbf{g}^{(0)})\mathbf{b}^{(0)} + \mathbf{b}_3(\mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{a}^{(*)}, \mathbf{g}^{(0)}),$$

obtendo $\mathbf{b}^{(*)}$.

3. Resolvemos o quarto sistema

$$\mathbb{A}_4\mathbf{e}^{(*)} = \mathbb{B}_4\mathbf{e}^{(0)} + \mathbf{b}_4(\mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{a}^{(*)}),$$

obtendo $\mathbf{e}^{(*)}$.

4. E finalmente resolvemos o quinto sistema

$$\mathbb{A}_5\mathbf{g}^{(*)} = \mathbb{B}_5\mathbf{g}^{(0)} + \mathbf{b}_5(\mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{b}^{(*)}),$$

obtendo $\mathbf{g}^{(*)}$.

5. Voltamos então no segundo sistema e resolvemos

$$\mathbb{A}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(*)}, \mathbf{e}^{(*)})\mathbf{a}^{(**)} = \mathbb{B}_2(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{b}^{(*)}, \mathbf{e}^{(*)})\mathbf{a}^{(0)} + \mathbf{b}_2(\mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{b}^{(*)}, \mathbf{e}^{(*)}),$$

obtendo $\mathbf{a}^{(**)}$.

6. Depois resolvemos

$$\mathbb{A}_3(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{a}^{(**)}, \mathbf{g}^{(*)})\mathbf{b}^{(**)} = \mathbb{B}_3(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{a}^{(**)}, \mathbf{g}^{(*)})\mathbf{b}^{(0)} + \mathbf{b}_3(\mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{g}^{(0)}, \mathbf{a}^{(**)}, \mathbf{g}^{(*)}),$$

obtendo $\mathbf{b}^{(**)}$.

7. Resolvemos

$$\mathbb{A}_4\mathbf{e}^{(**)} = \mathbb{B}_4\mathbf{e}^{(0)} + \mathbf{b}_4(\mathbf{a}^{(0)}, \mathbf{a}^{(**)}),$$

obtendo $\mathbf{e}^{(**)}$.

8. E finalmente resolvemos

$$\mathbb{A}_5\mathbf{g}^{(**)} = \mathbb{B}_5\mathbf{g}^{(0)} + \mathbf{b}_5(\mathbf{b}^{(0)}, \mathbf{b}^{(**)}),$$

obtendo $\mathbf{g}^{(**)}$.

9. Procedendo analogamente, obtemos sucessivos valores $\mathbf{a}^{(***)}$, $\mathbf{b}^{(***)}$, $\mathbf{e}^{(***)}$, $\mathbf{g}^{(***)}$. Procedemos dessa forma até que definamos as aproximações⁴ para $\mathbf{a}^{(1)}$, $\mathbf{b}^{(1)}$, $\mathbf{e}^{(1)}$, $\mathbf{g}^{(1)}$. Segundo os autores de [15], [22] e [27], geralmente não há ganhos ao se repetir muitas vezes essas iterações.
10. Os procedimentos de 1 a 8 são repetidos com $\mathbf{a}^{(1)}$, $\mathbf{b}^{(1)}$, $\mathbf{e}^{(1)}$, $\mathbf{g}^{(1)}$ no lugar de $\mathbf{a}^{(0)}$, $\mathbf{b}^{(0)}$, $\mathbf{e}^{(0)}$, $\mathbf{g}^{(0)}$, a fim de se obter as aproximações para $\mathbf{a}^{(2)}$, $\mathbf{b}^{(2)}$, $\mathbf{e}^{(2)}$, $\mathbf{g}^{(2)}$. E assim se segue sucessivamente.

⁴Resultados de convergência deste método podem ser encontrados nos trabalhos [15], [22] e [27].

3.4 Cálculo das Submatrizes de Rigidez

Consideremos $\mathcal{T}_h = \{T_1, T_2, \dots, T_{NT}\}$ uma triangulação adequada do domínio Ω_h . Quando nos referirmos ao triângulo de vértices $\xi_1 = (0, 0), \xi_2 = (1, 0), \xi_3 = (0, 1)$, o associaremos ao símbolo T_0 . Quando nos referirmos a um triângulo genérico de \mathcal{T}_h , digamos o p -ésimo triângulo T_p da triangulação de Ω_h , consideraremos que este é o triângulo de vértices $\mathbf{x}_1 = (x_1, y_1), \mathbf{x}_2 = (x_2, y_2), \mathbf{x}_3 = (x_3, y_3)$.

A transformação que leva o triângulo retângulo T_0 num triângulo genérico T_p é dada por:

$$S(\xi, \mu) = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \mu \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

É fácil verificar que $S(0, 0) = \mathbf{x}_1$, $S(1, 0) = \mathbf{x}_2$ e que $S(0, 1) = \mathbf{x}_3$. A Figura 3.4 ilustra um esquema da transformação S :

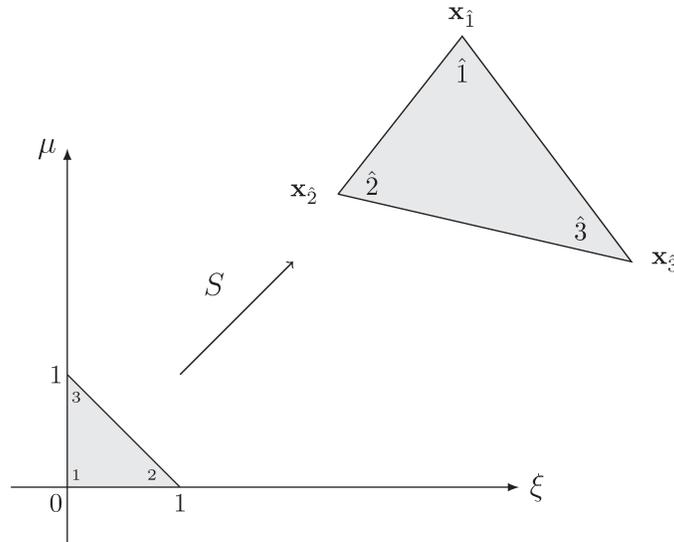


Figura 3.4: Transformação aplicada a um triângulo.

Consideremos as funções teste sobre T_p :

$$\varphi_{\hat{1}}(x, y) = 1 + \frac{(y_2 - y_3)(x - x_1) - (x_2 - x_3)(y - y_1)}{(y_3 - y_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)},$$

$$\varphi_{\hat{2}}(x, y) = \frac{(y_3 - y_1)(x - x_1) - (x_3 - x_1)(y - y_1)}{(y_3 - y_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)},$$

$$\varphi_{\hat{3}}(x, y) = \frac{(x_2 - x_1)(y - y_1) - (y_2 - y_1)(x - x_1)}{(y_3 - y_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)}.$$

Estas funções lineares tem uma característica especial sobre o triângulo T_p . Notemos que $\varphi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$, para cada $i, j = 1, 2, 3$, isto é,

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

Aplicando a transformação S^{-1} ao triângulo T_p obtemos o triângulo T_0 , não deixando de observar que $S^{-1}(\mathbf{x}_i) = \xi_i$, para cada $i = 1, 2, 3$. Na realidade as integrais serão feitas com uma eficiente mudança de variáveis de (x, y) para (ξ, μ) .

Usando as equações do sistema matricial (3.14), as funções lineares $\varphi_{\hat{1}}, \varphi_{\hat{2}}, \varphi_{\hat{3}}$, que antes estavam nas variáveis (x, y) , passam às variáveis (ξ, μ) :

$$\varphi_{\hat{1}}(\xi, \mu) = 1 - \xi - \mu, \quad \varphi_{\hat{2}}(\xi, \mu) = \xi, \quad \varphi_{\hat{3}}(\xi, \mu) = \mu.$$

E estas, assim como antes da mudança de variáveis, continuam possuindo uma característica especial sobre o triângulo T_0 , análoga àquela à qual nos referimos para as funções $\varphi_i(x, y)$ sobre o triângulo T_p . Em outras palavras, $\varphi_i(\xi_j) = \delta_{ij}$, para cada $i, j = 1, 2, 3$.

Notemos que o sistema dado pelas equações (3.7), (3.8), (3.9), (3.10) e (3.11) exige o cálculo das seguintes integrais:

$$\iint_{T_p} \varphi_i dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i = 1, \dots, N,$$

$$\iint_{T_p} \varphi_i \varphi_j dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i, j = 1, \dots, N,$$

$$\iint_{T_p} \varphi_i \varphi_j \varphi_k dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i, j, k = 1, \dots, N,$$

$$\iint_{T_p} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i, j = 1, \dots, N,$$

$$\iint_{T_p} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i, j = 1, \dots, N,$$

$$\iint_{T_p} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j dy dx, \text{ onde } p = 1, \dots, NT \text{ e } i, j = 1, \dots, N.$$

Porém, não precisamos fazer esses cálculos para cada triângulo, apenas para o triângulo T_0 , pois tais integrais sobre um triângulo genérico e sobre o triângulo T_0 diferem apenas pela multiplicação de uma constante, que é o jacobiano da transformação linear S (isto é do escopo de Cálculo Avançado e para mais detalhes sugerimos [31]). Apresentamos a seguir os cálculos envolvidos.

Por definição, o jacobiano da transformação S dada por $x = (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\mu + x_1$ e $y = (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\mu + y_1$, como em (3.14), é:

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \mu} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \mu} \end{vmatrix} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \mu} - \frac{\partial x}{\partial \mu} \frac{\partial y}{\partial \xi} = (y_3 - y_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1).$$

Então, podemos escrever o seguinte:

$$\begin{aligned} \iint_{T_p} f(x, y) \, dy \, dx &= \iint_{T_0} f(x(\xi, \mu), y(\xi, \mu)) |J(\xi, \mu)| \, d\mu \, d\xi = \\ &|J| \int_0^1 \int_0^{1-\xi} f(x(\xi, \mu), y(\xi, \mu)) \, d\mu \, d\xi. \end{aligned}$$

Voltando às funções $\varphi_{\hat{i}}$, sabemos que seus gradientes são constantes e dados por:

$$\begin{aligned} \nabla \varphi_{\hat{1}}(x, y) &= \left(\frac{y_2 - y_3}{J}, \frac{x_3 - x_2}{J} \right), \\ \nabla \varphi_{\hat{2}}(x, y) &= \left(\frac{y_3 - y_1}{J}, \frac{x_1 - x_3}{J} \right), \\ \nabla \varphi_{\hat{3}}(x, y) &= \left(\frac{y_1 - y_2}{J}, \frac{x_2 - x_1}{J} \right), \end{aligned}$$

onde $J = (y_3 - y_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)$ é o jacobiano da transformação S . Vamos calcular as referidas integrais sobre o triângulo T_p :

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \iint_{T_p} \nabla \varphi_{\hat{i}} \cdot \nabla \varphi_{\hat{j}} \, dy \, dx = |J| \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \nabla \varphi_{\hat{i}} \cdot \nabla \varphi_{\hat{j}} \, d\mu \, d\xi = \\ &|J| \nabla \varphi_{\hat{i}} \cdot \nabla \varphi_{\hat{j}} \int_0^1 \int_0^{1-\xi} 1 \, d\mu \, d\xi \quad i, j = 1, 2, 3, \end{aligned}$$

$$B_{ij} = \iint_{\Delta_p} \frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x} \varphi_{\hat{i}} \, dy \, dx = |J| \frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x} \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_{\hat{i}} \, d\mu \, d\xi \quad i, j = 1, 2, 3,$$

$$C_{ij} = \iint_{\Delta_p} \frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y} \varphi_{\hat{i}} \, dy \, dx = |J| \frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y} \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_{\hat{i}} \, d\mu \, d\xi \quad i, j = 1, 2, 3,$$

$$D_{ij} = \iint_{\Delta_p} \varphi_i \varphi_j \, dy \, dx = |J| \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_i \varphi_j \, d\mu \, d\xi \quad i, j = 1, 2, 3,$$

$$E_{ijk} = \iint_{\Delta_p} \varphi_i \varphi_j \varphi_k \, dy \, dx = |J| \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_i \varphi_j \varphi_k \, d\mu \, d\xi \quad i, j, k = 1, 2, 3.$$

Agora podemos calcular cada uma dessas matrizes. Com a ajuda do software *Mathematica*, obtemos:

$$\int_0^1 \int_0^{1-\xi} 1 \, d\mu \, d\xi = \frac{1}{2},$$

$$\int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_i \, d\mu \, d\xi = \frac{1}{6}, \text{ para } i = 1, 2, 3,$$

$$\int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_i \varphi_j \, d\mu \, d\xi = \begin{cases} \frac{1}{12}, & \text{se } i = j, \\ \frac{1}{24}, & \text{se } i \neq j, \end{cases}$$

$$\int_0^1 \int_0^{1-\xi} \varphi_i \varphi_j \varphi_k \, d\mu \, d\xi = \begin{cases} \frac{1}{20}, & \text{se } i = j = k, \\ \frac{1}{120}, & \text{se } i \neq j \text{ e } i \neq k \text{ e } j \neq k, \\ \frac{1}{60}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Assim, podemos concluir os cálculos das submatrizes de rigidez:

$$[A_{ij}] = |J| \times \frac{1}{2} \times \frac{1}{(J)^2} \times$$

$$\begin{bmatrix} (y_2 - y_3)^2 + (x_3 - x_2)^2 & (y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) & (y_2 - y_3)(y_1 - y_2) + (x_3 - x_2)(x_2 - x_1) \\ A_{12} & (y_3 - y_1)^2 + (x_1 - x_3)^2 & (y_1 - y_2)(y_3 - y_1) + (x_2 - x_1)(x_1 - x_3) \\ A_{13} & A_{23} & (y_1 - y_2)^2 + (x_2 - x_1)^2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2|J|} \times$$

$$\begin{bmatrix} (y_2 - y_3)^2 + (x_3 - x_2)^2 & (y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) & (y_2 - y_3)(y_1 - y_2) + (x_3 - x_2)(x_2 - x_1) \\ A_{12} & (y_3 - y_1)^2 + (x_1 - x_3)^2 & (y_1 - y_2)(y_3 - y_1) + (x_2 - x_1)(x_1 - x_3) \\ A_{13} & A_{23} & (y_1 - y_2)^2 + (x_2 - x_1)^2 \end{bmatrix}$$

$$[B_{ij}] = \frac{|J|}{6J} \times \begin{bmatrix} y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \end{bmatrix}$$

$$[C_{ij}] = \frac{|J|}{6J} \times \begin{bmatrix} x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \end{bmatrix}$$

$$[D_{ij}] = |J| \times \begin{bmatrix} \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{12} \end{bmatrix} \quad [E_{ij1}] = |J| \times \begin{bmatrix} \frac{1}{20} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} \end{bmatrix}$$

$$[E_{ij2}] = |J| \times \begin{bmatrix} \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{20} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \end{bmatrix} \quad [E_{ij3}] = |J| \times \begin{bmatrix} \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{20} \end{bmatrix}$$

Capítulo 4

Simulações Numéricas

Neste capítulo pretendemos realizar alguns experimentos computacionais que simulem o espalhamento de um poluente (esgoto doméstico e industrial) sobre a superfície da baía de Sepetiba, RJ, influenciando duas populações de macroalgas desta região. Estas populações competem inter e intra-especificamente por espaço e alimento e, além disso, a influência do poluente sobre cada uma dessas espécies pode ser de toxicidade ou de benefícios (neste caso, geralmente o poluente é uma fonte de alimento para a espécie beneficiada). Neste conjunto de elementos que interagem na baía de Sepetiba, estão inclusos também os esporos e gametas de cada uma das espécies de algas, que são as únicas “fontes” que dão origem a novos seres de suas respectivas espécies. Esta forma de reprodução chamada *metagênese* (esquematisada na Figura 2.1) está longe de ser a única forma de reprodução algal, porém foi adotada neste contexto pelo fato de a baía de Sepetiba ser habitada em sua grande maioria, pelo menos nos locais mais poluídos, por algas pardas (segundo [5]), que por sua vez apresentam como principal processo reprodutivo a *metagênese*.

É importante lembrar que as macroalgas são seres altamente dependentes da luz solar e, por isso, sua sobrevivência é restrita a lugares submersos cuja profundidade permita seu desenvolvimento. Por isso foi adotada uma faixa chamada de Ω_r (subconjunto do domínio Ω), que está esquematizada na Figura 2.2, fora da qual as macroalgas inexistem.

Pretendemos realizar algumas simulações, variando parâmetros de um cenário para outro. Em cada cenário, os parâmetros serão adotados de acordo com as características de cada espécie de macroalga, da competição entre as macroalgas, da influência do poluente sobre cada espécie e da circulação superficial da baía induzida pelo vento.

As figuras geradas a partir dos experimentos computacionais apresentadas a seguir representam o quadro interativo depois de 1000 iterações temporais, com um tempo final $t_f = 100$. Em todas as simulações foram adotadas as seguintes condições iniciais:

$$\mathbf{p}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{e}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{g}(0, \mathbf{x}) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega,$$

$$\mathbf{a}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{b}(0, \mathbf{x}) = \begin{cases} 0,4, & \text{se } \mathbf{x} \in \Omega_r, \\ 0, & \text{se } \mathbf{x} \notin \Omega_r. \end{cases}$$

A Tabela 4.1 mostra os valores adotados para os parâmetros em cada simulação numérica:

Par.	Sim. 1a, 1b e 1c	Sim. 2a, 2b e 2c	Sim. 3a e 3b
α_p	0,016	0,016	0,016
σ_p	0,00001	0,00001	0,00001
$\bar{\alpha}_a$	0,001	0,001	0,001
$\bar{\alpha}_b$	0,001	0,001	0,001
μ_a	-0,0001	0,001	-0,0002
μ_b	0,001	0,002	-0,0001
λ_a	0,1	0,1	0,1
λ_b	0,1	0,1	0,1
β_{aa}	1,0	1,0	1,0
β_{ab}	1,0	1,0	1,0
β_{ba}	1,0	1,0	1,0
β_{bb}	1,0	1,0	1,0
K	5,0	5,0	5,0
γ_a	0,005	0,004	0,004
γ_b	0,004	0,005	0,005
α_e	0,01	0,01	0,01
α_g	0,01	0,01	0,01
σ_e	0,0001	0,0001	0,0001
σ_g	0,0001	0,0001	0,0001
λ_e	0,05	0,05	0,05
λ_g	0,05	0,05	0,05

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados nas simulações numéricas.

Com exceção da simulação 1c, onde o parâmetro de transporte adotado foi $\mathbb{V} = (0, 0)$, a Tabela 4.2 mostra o parâmetro \mathbb{V} adotado em cada uma das simulações numéricas. Este parâmetro está relacionado com o fluxo advectivo (transporte) e representa a corrente superficial induzida pelo vento. No caso da simulação 1c, o cenário representado é de uma situação onde não há vento, logo não há corrente superficial que realize transporte.

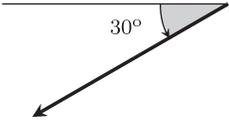
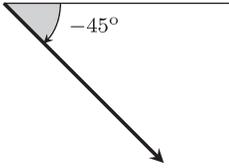
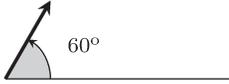
Sim. 1a, 2a e 3a	Sim. 1b, 2b e 3b	Sim. 2c
		
$\mathbb{V} = 0.1 \times \left(-\cos\left(\frac{\pi}{6}\right), -\text{sen}\left(\frac{\pi}{6}\right) \right)$	$\mathbb{V} = 0.1 \times \left(\cos\left(\frac{\pi}{4}\right), -\text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right) \right)$	$\mathbb{V} = 0.04 \times \left(\cos\left(\frac{\pi}{3}\right), \text{sen}\left(\frac{\pi}{3}\right) \right)$
Vento de \approx Leste-Nordeste	Vento de Noroeste	Vento de \approx Sul-Sudoeste

Tabela 4.2: Parâmetro de transporte.

O símbolo \approx na Tabela 4.2 indica a direção aproximada para a origem do vento, com um erro de $7,5^\circ$.

As simulações que serão apresentadas a seguir foram feitas com a ajuda do software MATLAB[®] versão 6.5 . O tempo de execução de cada simulação numérica foi de 7,5 horas em média, porém a implementação pode vir a ser mais eficiente.

As simulações 1a, 1b e 1c que apresentamos a seguir representam um cenário onde a ação do poluente sobre as algas de espécies 1 e 2 são de benefício e malefício, respectivamente. Porém, as algas de espécie 2 sobressaem em competição com as de espécie 1. O único fator que difere uma simulação da outra é a direção e a intensidade do vento. Os parâmetros adotados em cada simulação numérica estão apresentados na Tabela 4.1. A intensidade e a direção da corrente superficial induzida pelo vento estão representadas na Tabela 4.2. A única simulação onde não há corrente superficial, pois representa um cenário onde não há vento, é a simulação 1c, e neste caso $\mathbb{V} = (0, 0)$.

4.1 Simulação 1a

A Figura 4.1 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 1a:

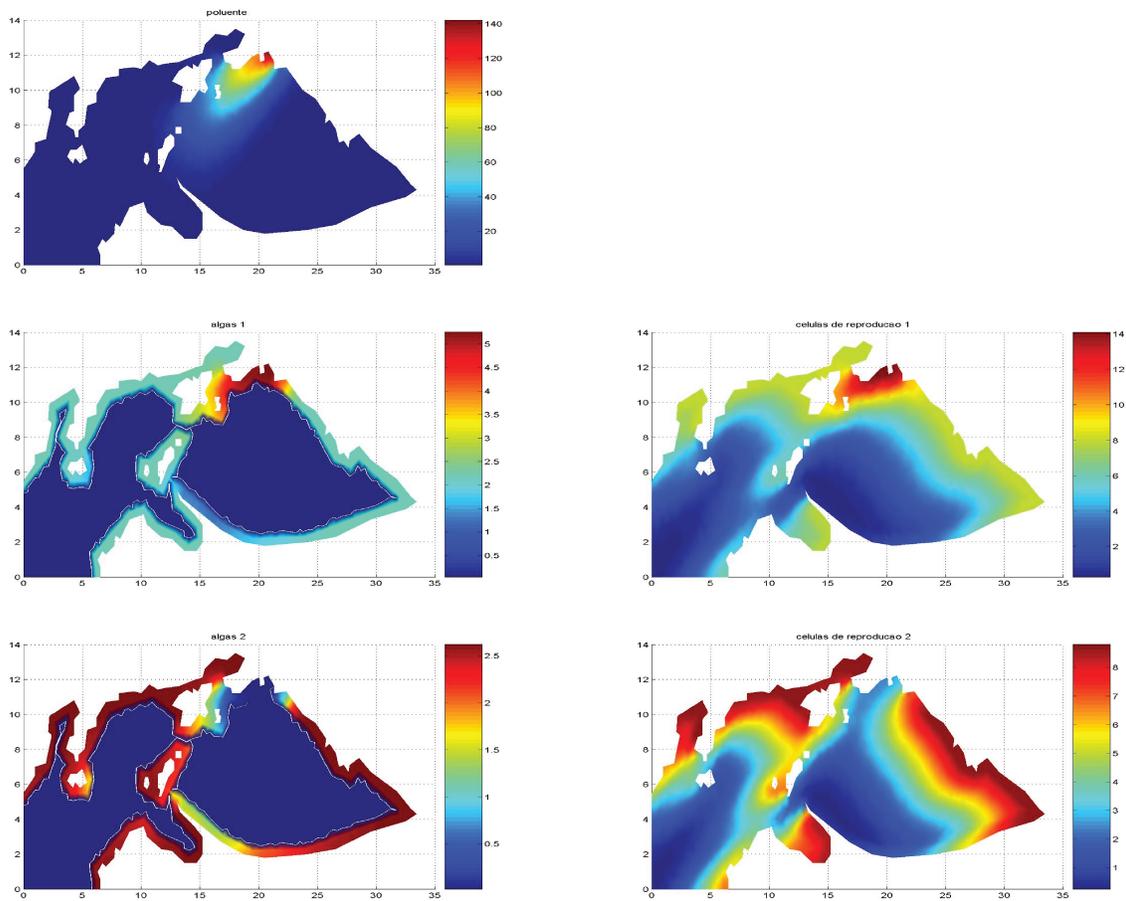


Figura 4.1: Cenário obtido a partir da simulação 1a.

4.2 Simulação 1b

A Figura 4.2 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 1b:

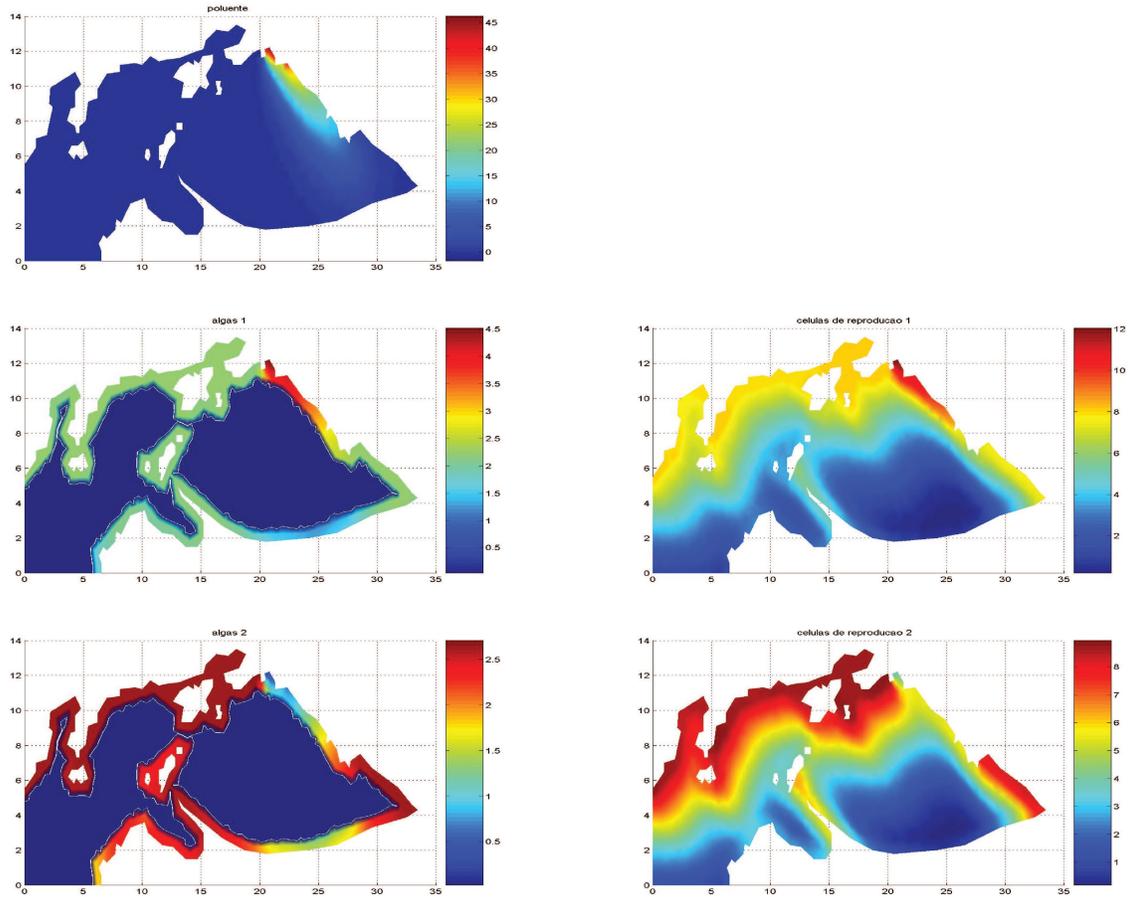


Figura 4.2: Cenário obtido a partir da simulação 1b.

4.3 Simulação 1c

A Figura 4.3 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 1c:

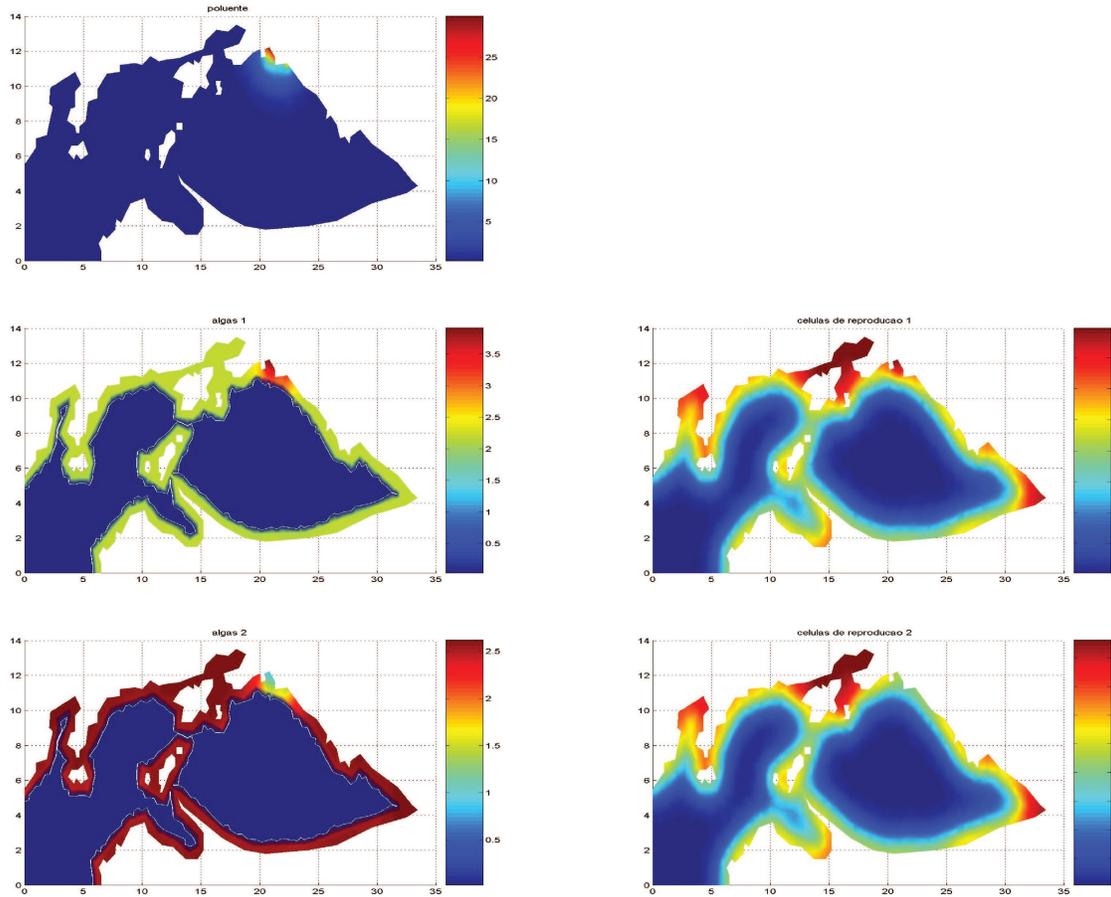


Figura 4.3: Cenário obtido a partir da simulação 1c.

As simulações 2a, 2b e 2c que apresentamos a seguir representam um cenário onde a ação do poluente sobre as algas de ambas espécies é de malefício, entretanto esta ação prejudicial do poluente é mais intensa sobre as algas de espécie 2. Além disso, as algas de espécie 1 têm melhor desempenho em competição com algas de espécie 2. Novamente, o fator diferencial entre uma simulação e outra é a direção do vento. Os parâmetros adotados em cada simulação numérica estão apresentados na Tabela 4.1. A intensidade e a direção da corrente superficial induzida pelo vento estão representadas na Tabela 4.2.

4.4 Simulação 2a

A Figura 4.4 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 2a:

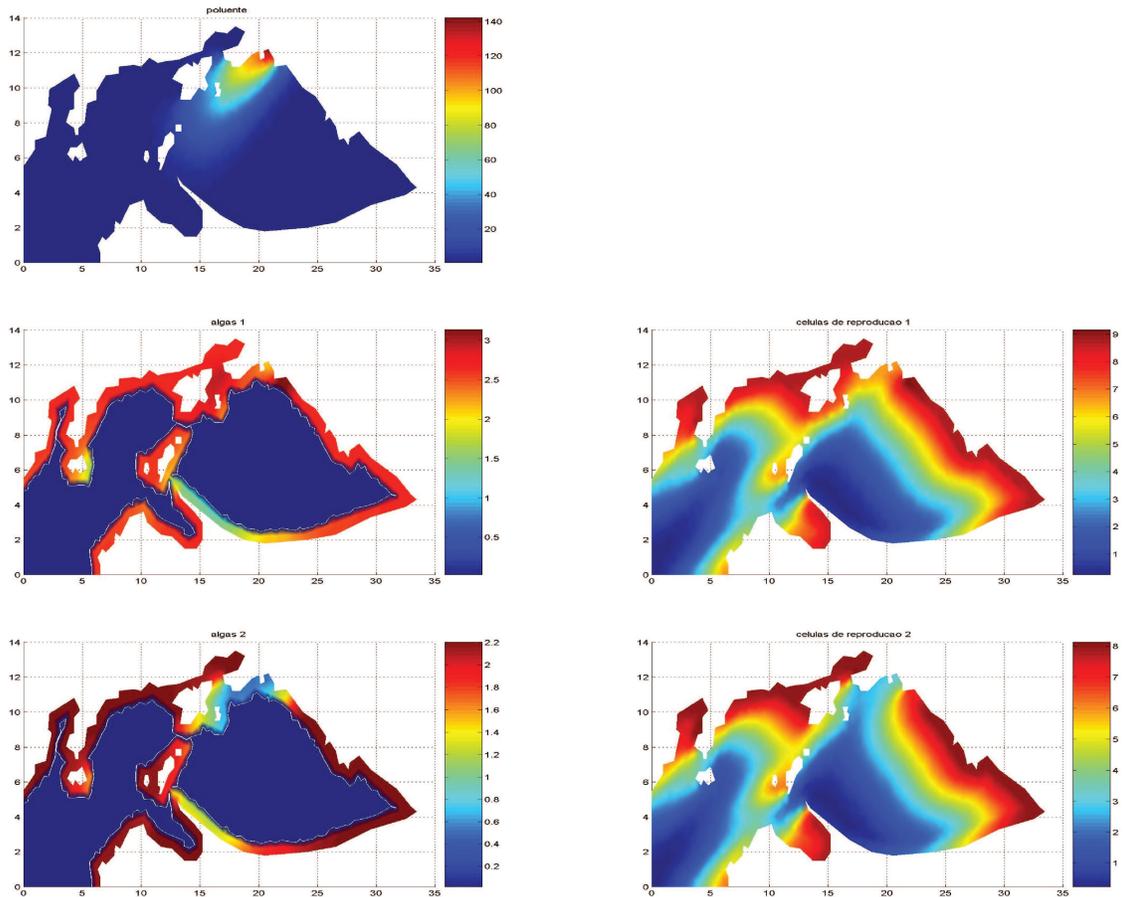


Figura 4.4: Cenário obtido a partir da simulação 2a.

4.5 Simulação 2b

A Figura 4.5 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 2b:

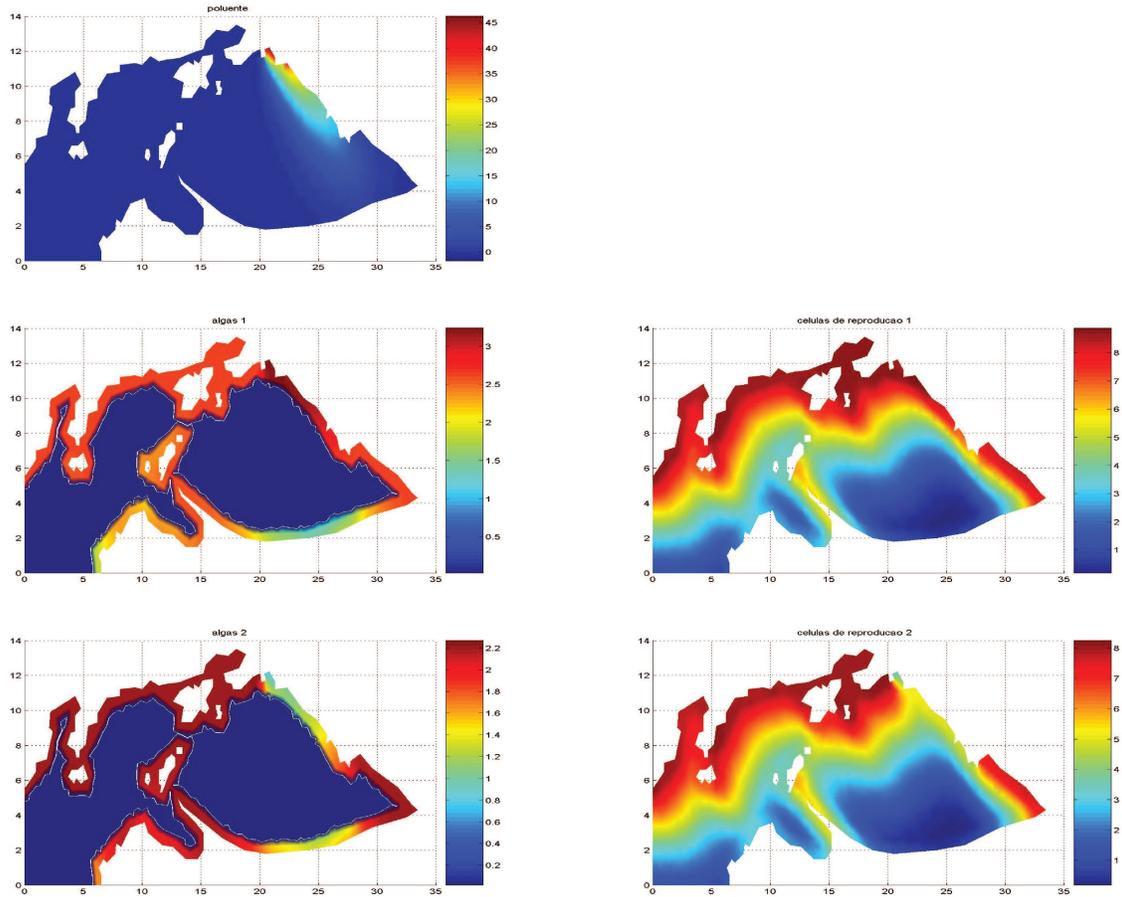


Figura 4.5: Cenário obtido a partir da simulação 2b.

4.6 Simulação 2c

A Figura 4.6 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 2c:

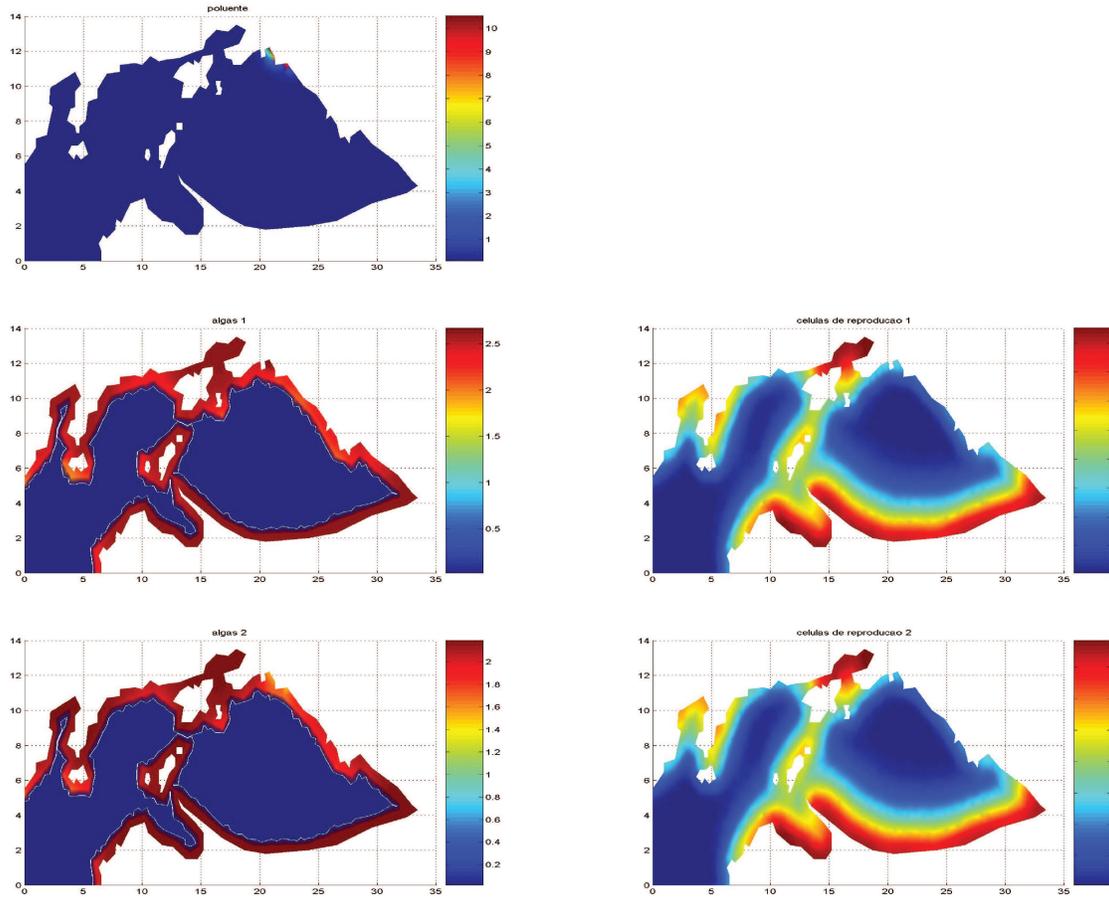


Figura 4.6: Cenário obtido a partir da simulação 2c.

As simulações 3a e 3b que apresentamos a seguir representam um cenário onde a ação do poluente sobre as algas de ambas espécies é de benefício, sendo mais intenso sobre as algas de espécie 1. Além disso, as algas de espécie 1 têm melhor desempenho em competição com algas de espécie 2. Novamente, a direção do vento é o fator diferencial entre uma simulação e outra. Os parâmetros adotados em cada simulação numérica estão apresentados na Tabela 4.1. A intensidade e a direção da corrente superficial induzida pelo vento estão representadas na Tabela 4.2.

4.7 Simulação 3a

A Figura 4.7 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 3a:

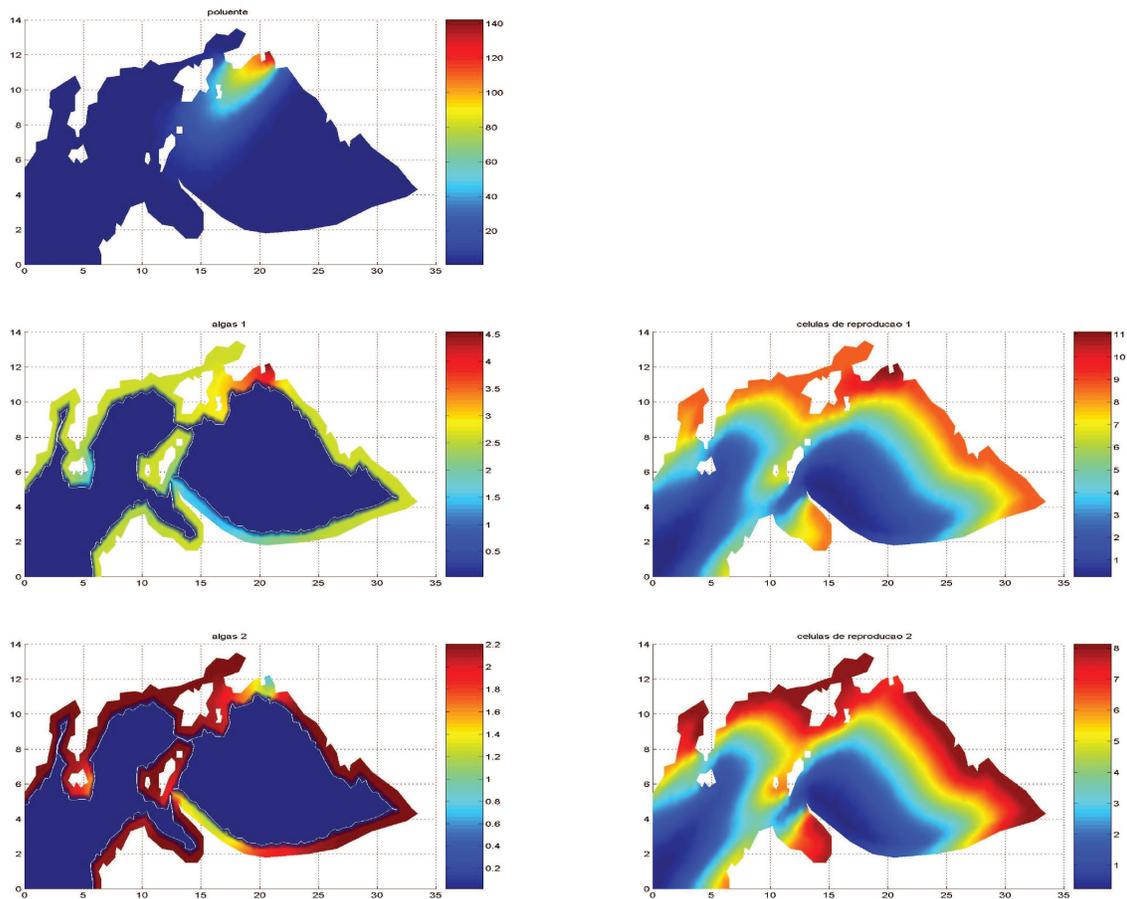


Figura 4.7: Cenário obtido a partir da simulação 3a.

4.8 Simulação 3b

A Figura 4.8 mostra o cenário obtido a partir da realização da simulação 3b:

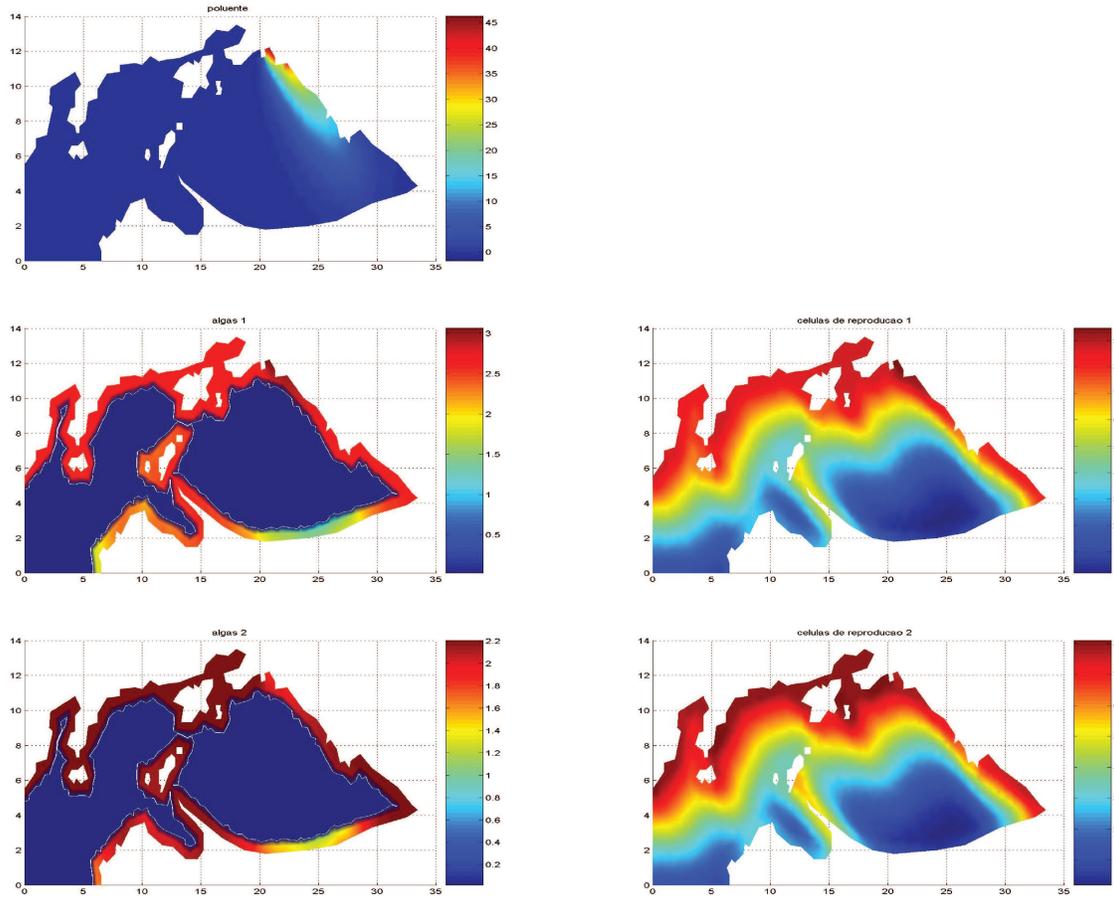


Figura 4.8: Cenário obtido a partir da simulação 3b.

- Pela simulação 1a podemos perceber que as algas de espécie 1 crescem intensamente em áreas mais poluídas, isto é, na parte central da baía, enquanto que as algas de espécie 2 tornam-se muito escassas ou até desaparecem dessas mesmas áreas. Este fato é bem razoável, visto que a concentração de poluente perto das fontes pontuais chega a níveis muito altos, o que leva a uma explosão populacional das algas de espécie 1, que também interfere no crescimento da outra espécie, além da poluição. Por outro lado, em áreas não afetadas pela poluição, as duas espécies parecem coexistir em equilíbrio, estando a espécie 2 mais concentrada na maior parte da baía, o que é bastante razoável, visto que esta espécie prevalece em competição com a outra espécie. Nas simulações 1b e 1c, a concentração de poluente não chega a níveis tão altos quanto na simulação 1a, devido à mudança de cenário de vento, pois no primeiro caso a direção do vento favorece o espalhamento do poluente. Isso proporciona resultados tão razoáveis quanto os da simulação 1a, porém não tão extremos.
- Pela simulação 2a podemos notar que as algas de espécie 1 são menos prejudicadas pela ação do poluente do que as de espécie 2, o que corresponde ao esperado. Vemos também que os locais de maior concentração da espécie 1 ficam ao redor do círculo de espalhamento do poluente. Esta situação não acontece na simulação 2b. Neste caso, as algas de espécie 1 se concentram proporcionalmente em locais mais poluídos. Isto é devido ao fato de a concentração de poluente não chegar a níveis tão altos como na simulação 2a, a ponto de prejudicar o crescimento de algas de espécie 1 próximo às fontes pontuais. Já na simulação 2c, apesar de a intensidade do transporte ser menor, a direção do vento faz com que o poluente não consiga chegar a níveis tão altos, e sua influência sobre as plantas marinhas pode ser sutilmente notada em locais bem próximos às fontes pontuais. Em locais não atingidos pelo poluente, em qualquer cenário de vento, as algas predominantes são as de espécie 1, que competem melhor.
- Nas simulações 3a e 3b podemos notar que, apesar de a ação do poluente ser de benefício para ambas espécies, as algas de espécie 2 acabam sendo prejudicadas pelo crescimento de algas de espécie 1 provocado pela poluição. Este quadro é mais extremo na simulação 3a, onde a poluição chega a níveis bastante altos.
- Em todas as simulações, podemos notar que as células de reprodução acompanham proporcionalmente as concentrações de algas de suas respectivas espécies. Notamos também que as células de reprodução tornam-se escassas em alguns locais devido à influência da circulação superficial da baía induzida pelo vento (é claro que tais locais são diferentes a cada mudança de cenário de vento). Nestes mesmos locais as algas tornam-se proporcionalmente mais escassas. Isto fortalece o fato de as células de reprodução de macroalgas (que se reproduzem por metagênese) serem bastante importantes para a sobrevivência de sua espécie. É também que a circulação da baía pode ser um fator potencialmente importante para garantir a ocupação de certas espécies de macroalgas em determinados locais da baía.

Capítulo 5

Conclusões

Este trabalho visou principalmente enfatizar que a simulação numérica é um bom instrumento para análise de situações de impacto ambiental, neste caso envolvendo uma dinâmica populacional de macroalgas em um ecossistema marinho alterado. Já era conhecido o fato de as macroalgas serem um dos principais bioindicadores de poluição local, por serem organismos que vivem fixos ao substrato. E este fato ficou indiscutivelmente evidenciado nos experimentos computacionais realizados, onde se pode notar claramente a imediata reação destes organismos em locais atingidos pelo poluente, indicando os locais onde há distúrbios ecológicos por alterações do meio. Isto fortalece o fato de ser possível simular cenários reais utilizando a ferramenta computacional aqui desenvolvida.

Primeiramente foi elaborado um modelo que pudesse descrever a interação envolvendo macroalgas e poluição. Este modelo foi discretizado, possibilitando a procura por uma solução numérica, e o algoritmo resultante dessa discretização foi implementado e testado. Buscando uma situação mais realística, o modelo foi incrementado e então passou pelos mesmos processos que o anterior. A elaboração de um modelo que pudesse descrever uma interação parcialmente conhecida, a implementação do modelo e a busca por parâmetros adequados para gerar simulações, foram tarefas árduas no desenvolvimento deste trabalho. A falta de parâmetros conhecidos, devido à pouca quantidade de estudos de campo realizados na baía, dificultou a realização de testes computacionais que pudessem evidenciar a validade do programa.

Todos os experimentos realizados com parâmetros adequados produziram resultados coerentes e intuitivos, mostrando que este programa é funcional de fato. Além disto, pudemos perceber que o uso de parâmetros hipotéticos irreais pode levar a resultados exagerados ou mesmo a quadros caóticos. Situações como estas puderam ser notadas durante a realização de várias simulações, entre as quais destacou-se uma simulação com parâmetros de difusibilidade extremamente altos - se comparados com parâmetros de difusibilidade reais - juntamente com parâmetros de transporte não nulos.

Apesar de ser apenas um modelo teórico com parâmetros hipotéticos, é possível estimar, através de simulações, quais seriam as áreas mais atingidas pelo poluente dependendo da direção do vento, e como a flora marinha local reagiria em cada situação, dependendo da sensibilidade de cada espécie de macroalga com relação à poluição. Este trabalho é também um dos primeiros envolvendo poluição e macroalgas na baía de Sepetiba. Pode ser considerado um passo dado para a construção de outros trabalhos que venham a ser desenvolvidos sobre este mesmo assunto, que ainda necessita de pesquisadores que tenham interesse em contribuir para a preservação das espécies locais de macroalgas e, conseqüentemente, contribuir para a preservação do ecossistema local.

Em resumo, foi possível criar um instrumento que contribui positivamente para planejar e executar ações ambientais de diversos tipos com vistas a um uso sustentável da região.

Referências Bibliográficas

- [1] www.ib.usp.br/algamare-br/Macroalgas.html.
- [2] www.maps.google.com.br.
- [3] www.scielo.br/pdf/rbb/v26n3/18952.pdf.
- [4] [http://br.geocities.com/bermudesbio/materias/reproducao _ algas/alternancia.html](http://br.geocities.com/bermudesbio/materias/reproducao_algas/alternancia.html).
- [5] G. M. Amado Filho, M. B. B. B. Barreto, B. V. Marins, “Estrutura das Comunidades Fitobentônicas do Infralitoral da Baía de Sepetiba, RJ, Brasil”, *Revista Brasileira de Botânica*, V. 26, n. 3, 2003, p. 329-342.
- [6] M. S. F. Argento, D. T. M. A. Costa, C. H. Reis, *Análise da Distribuição Temporo-Espacial de Metais Pesados na Baía de Sepetiba com Suporte do Geoprocessamento*, Anais XI SBSR, INPE, Belo Horizonte/MG, 2003, p. 423-430.
- [7] R. G. Bartle, *The Elements of Integration and Lebesgue Measure*, Wiley-Interscience, 1ª ed., 1995, 192 p.
- [8] F. A. S. Berchez, E. C. Oliveira, “Temporal changes in the benthic marine flora of Baía de Santos, SP, Brazil, over the last four decades”, *Algae and environment: a general approach*, Sociedade Brasileira de Ficologia, São Paulo, 1992, p. 120-131.
- [9] S. C. Brenner, L. R. Scott, *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Springer, 3ª ed., 2007, 402 p.
- [10] R. L. Burden, J. D. Faires, *Numerical Analysis*, Brooks Cole, 7ª ed., 2000, 864 p.
- [11] R. S. Cantrell, C. Cosner, *Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations*, Wiley, illustrated ed., 2003, 428 p.
- [12] P. G. Ciarlet, *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, SIAM, 2ª ed., 2002, 530 p.
- [13] H. Curtis, R. F. Evert, P. H. Raven, *Biologia Vegetal*, Guanabara Koogan S.A., Rio de Janeiro, 6ª ed., 2001, 906 p.

- [14] G. L. Diniz, *Dispersão de Poluentes num Sistema Ar-Água: Modelagem, Aproximação e Aplicações*, Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia de Sistemas, FEEC - Unicamp, Campinas/SP, 2003, 120 p.
- [15] J. Douglas Jr., T. Dupont, R. E. Ewing, “Incomplete Iteration for Time-Stepping a Galerkin Method for a Quasi-Linear Parabolic-Problem”, *SIAM, Journal of Numerical Analysis*, V. 16, 1979, p. 503-522.
- [16] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, McGraw-Hill Companies, 1^a ed., 1988, 608 p.
- [17] N. F. Inforzato, *Dispersão de Poluentes num Sistema Ar-Água : Modelagem Matemática, Aproximação Numérica e Simulação Computacional*, Tese de Doutorado, Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - Unicamp, Campinas/SP, 2008, 110p.
- [18] H. Kardestuncer, H. N. Douglas, *Finite Element Handbook*, Mcgraw-Hill, New York, 1987, 1424 p.
- [19] C. M. Leitão Filho, A. N. Marques Junior, R. C. Pereira, C. A. R. Silva, V. L. Teixeira, “Seasonal Variations in Infralittoral Seaweed Communities under a Pollution Gradient in Baía de Guanabara, Rio de Janeiro (Brazil)”, *Ciência & Cultura*, V. 39, 1987, p. 423-428.
- [20] S. A. Levin, A. Okubo, *Diffusion and Ecological Problems: Modern Perspectives*, Springer, 2^a ed., 2002, 467 p.
- [21] J. L. Lions, *Équations Différentielles Opérationnelles et Problèmes Aux Limites*, Springer, Berlin, 1961, 292 p.
- [22] J. F. C. A. Meyer, *Modelagem e Simulação Numérica do Transiente Térmico em Meios Compostos*, Tese de Doutorado, Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - Unicamp, Campinas/SP, 1988.
- [23] J. D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer, 3^a ed., 2008, 736 p.
- [24] R. F. Oliveira, *O Comportamento Evolutivo de uma Mancha de Óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: Modelagem, Análise Numérica e Simulações*, Tese de Doutorado, Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - Unicamp, Campinas/SP, 2003, 95 p.
- [25] E. J. Paula, M. T. M. Széchy, “Padrões Estruturais Quantitativos de Bancos de *Sargassum* (Phaeophyta, Fucales) do Litoral dos Estados do Rio de Janeiro e São Paulo, Brasil”, *Revista Brasileira de Botânica*, V. 23, n. 2, 2000, p. 121-132.
- [26] I. R. F. Poffo, *Gerenciamento de riscos socioambientais no complexo portuário de Santos na ótica ecossistêmica*, Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação em Ciência Ambiental - USP, São Paulo/SP, 2007, 159 p.

- [27] H. H. Rachford, “Two-Level Discrete-Time Galerkin Approximations for Second-Order Non-Linear Parabolic Partial Differential Equations”, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, V. 06, 1973, p. 1010-1026.
- [28] E. E. F. S. Rêgo, *Utilização de Macroalgas como Bioindicadores*, Monografia, Departamento de Biologia, IBB - Unitau, Taubaté/SP, 2007, 18 p.
- [29] M. M. Salvatierra, *Modelagem Matemática e Simulação Computacional da Presença de Materiais Impactantes Tóxicos em Casos de Dinâmica Populacional com Competição Inter e Intra-Específica*, Dissertação de Mestrado, Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - Unicamp, Campinas/SP, 2005, 53 p.
- [30] R. C. Sossae, *A Presença Evolutiva de um Material Impactante e seu Efeito no Transiente Populacional de Espécies Interativas: Modelagem e Aproximação*, Tese de Doutorado, Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - Unicamp, Campinas/SP, 2003, 98 p.
- [31] J. Stewart, *Cálculo*, Pioneira, Vol. 2, 5^a ed., 2005, 1218 p.

Apêndice A

Implementação Computacional

```
% Descricao: Interacao entre um tipo de poluente, duas especies de
% macroalgas e suas celulas de reproducao na baía de Sepetiba.
%
clear all; t0=clock; format long;
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%          Parametros do problema          %
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%poluente
%coeficiente de difusao do poluente
alfp=0.016;
%coeficiente de decaimento do poluente
sigp=0.00001;
%fonte(s) de poluicao (esgoto domestico)
F=0.2;
%
%algas 1
%coeficiente de difusao da alga
alfa=0.001;
%coeficiente de decaimento das algas por poluente
sigap=-0.0001;
%coeficiente de reproducao das algas
lama=0.1;
%termo de competicao interespecifica
alfab=0.0025;
%
%algas 2
%coeficiente de difusao da alga
alfb=0.001;
%coeficiente de decaimento das algas por poluente
sigbp=0.001;
%coeficiente de reproducao das algas
lamb=0.1;
%termo de competicao interespecifica
alfba=0.002;
%
%esporos 1
%coeficiente de difusão dos esporos
alfe=0.01;
%coeficiente de decaimento dos esporos
sige=0.0001;
%coeficiente da fonte de esporos (algas)
lame=0.05;
```

```

%
%esporos 2
%coeficiente de difusão dos esporos
alfeb=0.01;
%coeficiente de decaimento dos esporos
sigeb=0.0001;
%coeficiente da fonte de esporos (algas)
lameb=0.05;
%
%outros parametros
%transporte de poluente na direcao horizontal
w1=-0.1*cos(pi/6);
%transporte de poluente na direcao vertical
w2=-0.1*sin(pi/6);
%transporte de esporo na direcao horizontal
v1=-0.1*cos(pi/6);
%transporte de esporo na direcao vertical
v2=-0.1*sin(pi/6);
%termos de correcao da capacidade de suporte
betab=1;
betba=1;
% capacidade de suporte
K=5.0;
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               %
%      Parametros da discretizacao      %
%                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%instante final
tfin=100;
%numero de iteracoes temporais
itmax=1000;
%intervalo de tempo de cada iteracao temporal
dt=tfin/itmax;
%numero total de nos
nn=1652;
%numero total de elementos (triangulos)
ntr=3044;
%
% Abrindo a matriz malha (malha.dat)
fid = fopen('malha.dat','r');
malha = fscanf(fid,'%d',[9 ntr]);
malha = malha';
malha = [malha(:,7),malha(:,8),malha(:,9)];
fclose(fid);
% Abrindo a matriz de coordenadas dos pontos (coord.dat)
fid = fopen('coord.dat','r');
coord = fscanf(fid,'%lf',[4 nn]);
coord = coord';
coord = [coord(:,2) coord(:,3)];
fclose(fid);
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               %
%      Condições Iniciais e Fonte      %
%                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
e0=zeros(nn,1);
a0=zeros(nn,1);
eb0=zeros(nn,1);
b0=zeros(nn,1);
p0=zeros(nn,1);
f=zeros(nn,1);

```

```

%f(53)=F;
f(44)=F;
f(46)=F;
f(47)=F;
%
for i=1:nn
    if ((1<=i & i<=96)|(98<=i & i<=287)|(312<=i & i<=589))
        a0(i)=0.4;
        b0(i)=0.4;
    end
end
end
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               %
%          Submatrizes de Rigidez          %
%                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
fffix=[1/12 1/24 1/24
        1/24 1/12 1/24
        1/24 1/24 1/12];
fff1fix=[(1/20),(1/60),(1/60);
          (1/60),(1/60),(1/120);
          (1/60),(1/120),(1/60)];
fff2fix=[(1/60),(1/60),(1/120);
          (1/60),(1/20),(1/60);
          (1/120),(1/60),(1/60)];
fff3fix=[(1/60),(1/120),(1/60);
          (1/120),(1/60),(1/60);
          (1/60),(1/60),(1/20)];
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               %
%          Preenchimento das matrizes          %
%                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
ee=sparse(nn,nn); ed=sparse(nn,nn);
ae=sparse(nn,nn); ad=sparse(nn,nn);
ebe=sparse(nn,nn); ebd=sparse(nn,nn);
be=sparse(nn,nn); bd=sparse(nn,nn);
pe=sparse(nn,nn); pd=sparse(nn,nn);
for itr = 1:ntr
    for il = 1:3
        ig = malha(itr,il);
        x(il) = coord(ig,1);
        y(il) = coord(ig,2);
    end
    jac = (x(2)-x(1))*(y(3)-y(1))-(x(3)-x(1))*(y(2)-y(1));
    s = abs(jac);
    %%
    dfdx(1)=y(2)-y(3); dfdy(1)=x(3)-x(2);
    dfdx(2)=y(3)-y(1); dfdy(2)=x(1)-x(3);
    dfdx(3)=y(1)-y(2); dfdy(3)=x(2)-x(1);
    %%
    ggx=(1/(2*s))*[(dfdx(1)^2) (dfdx(1)*dfdx(2)) (dfdx(1)*dfdx(3))
                   (dfdx(2)*dfdx(1)) (dfdx(2)^2) (dfdx(2)*dfdx(3))
                   (dfdx(3)*dfdx(1)) (dfdx(3)*dfdx(2)) (dfdx(3)^2)];
    ggy=(1/(2*s))*[(dfdy(1)^2) (dfdy(1)*dfdy(2)) (dfdy(1)*dfdy(3))
                   (dfdy(2)*dfdy(1)) (dfdy(2)^2) (dfdy(2)*dfdy(3))
                   (dfdy(3)*dfdy(1)) (dfdy(3)*dfdy(2)) (dfdy(3)^2)];
    gg=ggx+ggy;
    %%
    fxf = (s/(6*jac))*[dfdx(1) dfdx(2) dfdx(3)
                      dfdx(1) dfdx(2) dfdx(3)

```

```

                dfdx(1) dfdx(2) dfdx(3)];
fyf = (s/(6*jac))*[dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3)
                dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3)
                dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3)];

%%
ff = s*fffix;
%
for il = 1:3
    ig = malha(itr,il);
    for jl = 1:3
        jg = malha(itr,jl);
        %%
        ee(ig,jg) = ee(ig,jg) + (1+sige*dt/2)*ff(il,jl) + (alfe*dt/2)*gg(il,jl) + ...
            (v1*dt/2)*fxf(il,jl) + (v2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
        ed(ig,jg) = ed(ig,jg) + (1-sige*dt/2)*ff(il,jl) - (alfe*dt/2)*gg(il,jl) - ...
            (v1*dt/2)*fxf(il,jl) - (v2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
        %%
        ebe(ig,jg) = ebe(ig,jg) + (1+sige*dt/2)*ff(il,jl) + (alfeb*dt/2)*gg(il,jl) + ...
            (v1*dt/2)*fxf(il,jl) + (v2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
        ebd(ig,jg) = ebd(ig,jg) + (1-sige*dt/2)*ff(il,jl) - (alfeb*dt/2)*gg(il,jl) - ...
            (v1*dt/2)*fxf(il,jl) - (v2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
        %%
        pe(ig,jg) = pe(ig,jg) + (1+sigp*dt/2)*ff(il,jl) + (alfp*dt/2)*gg(il,jl) + ...
            (w1*dt/2)*fxf(il,jl) + (w2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
        pd(ig,jg) = pd(ig,jg) + (1-sigp*dt/2)*ff(il,jl) - (alfp*dt/2)*gg(il,jl) - ...
            (w1*dt/2)*fxf(il,jl) - (w2*dt/2)*fyf(il,jl); %%
    end
end
aux1=malha(itr,1); aux2=malha(itr,2); aux3=malha(itr,3);
if ((1<=aux1 & aux1<=96)|(98<=aux1 & aux1<=287)|(312<=aux1 & aux1<=589))&...
    ((1<=aux2 & aux2<=96)|(98<=aux2 & aux2<=287)|(312<=aux2 & aux2<=589))&...
    ((1<=aux3 & aux3<=96)|(98<=aux3 & aux3<=287)|(312<=aux3 & aux3<=589))
    for il = 1:3
        ig = malha(itr,il);
        for jl = 1:3
            jg = malha(itr,jl);
            ae(ig,jg) = ae(ig,jg) + ff(il,jl) + (alfa*dt/2)*gg(il,jl);
            ad(ig,jg) = ad(ig,jg) + ff(il,jl) - (alfa*dt/2)*gg(il,jl);
            %%
            be(ig,jg) = be(ig,jg) + ff(il,jl) + (alfb*dt/2)*gg(il,jl);
            bd(ig,jg) = bd(ig,jg) + ff(il,jl) - (alfb*dt/2)*gg(il,jl);
        end
    end
end %fecha o if
end %fecha o for dos triangulos
%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
%      Plotando a condicao inicial      %
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
subplot(3,2,1);
trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),p0), title('poluente'), view(0,90),...
colorbar, shading interp;
subplot(3,2,3);
trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),a0), title('algas 1'), view(0,90),...
colorbar, shading interp;
subplot(3,2,5);
trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),e0), title('celulas de reproducao 1'), view(0,90),...
colorbar, shading interp;
subplot(3,2,4);
trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),b0), title('algas 2'), view(0,90),...
colorbar, shading interp;

```

```

subplot(3,2,6);
trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),eb0), title('celulas de reproducao 2'), view(0,90),...
colorbar, shading interp;
pause;
%
e1=e0;
a1=a0;
eb1=eb0;
b1=b0;
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               %
%      Inicio das iteracoes temporais      %
%                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
for it=1:itmax
    %
    %Resolvendo para o poluente
    dirp=pd*p0+dt*f;
    dirp=sparse(dirp);
    pe=sparse(pe);
    p1=pe\dirp;
    %
    aes=sparse(ae); ads=sparse(ad);
    bes=sparse(be); bds=sparse(bd);
    %
    for itr=1:ntr
        for il = 1:3
            i=malha(itr,il);
            x(il) = coord(i,1);
            y(il) = coord(i,2);
        end
        jac = (x(2)-x(1))*(y(3)-y(1))-(x(3)-x(1))*(y(2)-y(1));
        s = abs(jac);
        fff(1,.,:)=s*fff1fix;
        %
        fff(2,.,:)=s*fff2fix;

        fff(3,.,:)=s*fff3fix;
        %%
        aux1=malha(itr,1); aux2=malha(itr,2); aux3=malha(itr,3);
        if ((1<=aux1 & aux1<=96)|(98<=aux1 & aux1<=287)|(312<=aux1 & aux1<=589))&...
            ((1<=aux2 & aux2<=96)|(98<=aux2 & aux2<=287)|(312<=aux2 & aux2<=589))&...
            ((1<=aux3 & aux3<=96)|(98<=aux3 & aux3<=287)|(312<=aux3 & aux3<=589))
            for il = 1:3
                ig = malha(itr,il);
                for jl = 1:3
                    jg = malha(itr,jl);
                    for kl=1:3
                        kg=malha(itr,kl);
                        aes(ig,jg) = aes(ig,jg) + (sigap*dt/2)*((p0(kg)+p1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
                        %%
                        ads(ig,jg) = ads(ig,jg) - (sigap*dt/2)*((p0(kg)+p1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
                        %%
                        bes(ig,jg) = bes(ig,jg) + (sigbp*dt/2)*((p0(kg)+p1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
                        %%
                        bds(ig,jg) = bds(ig,jg) - (sigbp*dt/2)*((p0(kg)+p1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
                    end
                end
            end
        end
    end
end %fecha o if
end %fecha o for dos triangulos
%%

```

```

%inicio das iteracoes do metodo de aproximacao temporal
for inl=1:6
aet=sparse(aes); adt=sparse(ads);
bet=sparse(bes); bdt=sparse(bds);
nla=zeros(nn,1);
nle=zeros(nn,1);
nlb=zeros(nn,1);
nleb=zeros(nn,1);
%%
for itr=1:ntr
for il = 1:3
i=malha(itr,il);
x(il) = coord(i,1);
y(il) = coord(i,2);
end
jac = (x(2)-x(1))*(y(3)-y(1))-(x(3)-x(1))*(y(2)-y(1));
s = abs(jac);
%
ff = s*fffix;
%
for il = 1:3
ig = malha(itr,il);
for jl = 1:3
jg=malha(itr,jl);
%
nle(ig)=nle(ig)+lame*((a1(jg)+a0(jg))/2)*ff(il,jl);
%
nleb(ig)=nleb(ig)+lameb*((b1(jg)+b0(jg))/2)*ff(il,jl);
%
end
end
end %fecha o for dos triangulos
%
ee=sparse(ee); ebe=sparse(ebe);
dire=ed*e0+dt*nle;
dire=sparse(dire);
direb=ebd*eb0+dt*nleb;
direb=sparse(direb);
%%
e1=ee\dire;
%%
eb1=ebe\direb;
%%
for itr=1:ntr
for il = 1:3
i=malha(itr,il);
x(il) = coord(i,1);
y(il) = coord(i,2);
end
jac = (x(2)-x(1))*(y(3)-y(1))-(x(3)-x(1))*(y(2)-y(1));
s = abs(jac);
%
ff = s*fffix;
%
fff(1,.,:)=s*fff1fix;
%
fff(2,.,:)=s*fff2fix;
%
fff(3,.,:)=s*fff3fix;
%%
aux1=malha(itr,1); aux2=malha(itr,2); aux3=malha(itr,3);
if ((1<=aux1 & aux1<=96)|(98<=aux1 & aux1<=287)|(312<=aux1 & aux1<=589))&...
((1<=aux2 & aux2<=96)|(98<=aux2 & aux2<=287)|(312<=aux2 & aux2<=589))&...
((1<=aux3 & aux3<=96)|(98<=aux3 & aux3<=287)|(312<=aux3 & aux3<=589))

```

```

for il = 1:3
    ig = malha(itr,il);
    for jl = 1:3
        jg = malha(itr,jl);
        %%
        nla(ig)=nla(ig)+lama*((e1(jg)+e0(jg))/2)*ff(il,jl);
        for kl=1:3
            kg=malha(itr,kl);
            %%
            nla(ig)=nla(ig)-(betab*lama/K)*[(b0(kg)+b1(kg))/2*(e0(jg)+e1(jg))/2* fff(kl,il,jl)];
            %%
            aet(ig,jg) = aet(ig,jg)+(dt*lama/(2*K))*[(e0(kg)+e1(kg))/2 * fff(kl,il,jl)]+...
            (alfab*dt/2)*((b0(kg)+b1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
            %%
            adt(ig,jg) = adt(ig,jg)-(dt*lama/(2*K))*[(e0(kg)+e1(kg))/2 * fff(kl,il,jl)]-...
            (alfab*dt/2)*((b0(kg)+b1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
            %%
        end
    end
end
end
end %fecha o for dos triangulos
%%
% Resolvendo para a alga 1
%
dira=adt*a0+dt*nla;
dira=sparse(dira);
aet=sparse(aet);
%
for i=1:nn
    if (i==97|(i>287 & i<312)|i>589)
        aet(i,i)=1;
    end
end
a1=aet\(dira);
%%
for itr=1:ntr
    for il = 1:3
        i=malha(itr,il);
        x(il) = coord(i,1);
        y(il) = coord(i,2);
    end
    jac = (x(2)-x(1))*(y(3)-y(1))-(x(3)-x(1))*(y(2)-y(1));
    s = abs(jac);
    %
    ff = s*ffffix;
    %
    fff(1,.,:)=s*ffff1fix;
    %
    fff(2,.,:)=s*ffff2fix;
    %
    fff(3,.,:)=s*ffff3fix;
    %%
    aux1=malha(itr,1); aux2=malha(itr,2); aux3=malha(itr,3);
    if ((1<=aux1 & aux1<=96)|(98<=aux1 & aux1<=287)|(312<=aux1 & aux1<=589))&...
        ((1<=aux2 & aux2<=96)|(98<=aux2 & aux2<=287)|(312<=aux2 & aux2<=589))&...
        ((1<=aux3 & aux3<=96)|(98<=aux3 & aux3<=287)|(312<=aux3 & aux3<=589))
        for il = 1:3
            ig = malha(itr,il);
            for jl = 1:3
                jg = malha(itr,jl);
                %%
                nlb(ig)=nlb(ig)+lamb*((eb1(jg)+eb0(jg))/2)*ff(il,jl);
                for kl=1:3

```

```

        kg=malha(itr,kl);
        %%
        nlb(ig)=nlb(ig)-(betba*lamb/K)*[(a0(kg)+a1(kg))/2*(eb0(jg)+eb1(jg))/2*fff(kl,il,jl)];
        %%
        bet(ig,jg) = bet(ig,jg)+(dt*lamb/(2*K))*[(eb0(kg)+eb1(kg))/2 * fff(kl,il,jl)]+...
        (alfba*dt/2)*((a0(kg)+a1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
        %%
        bdt(ig,jg) = bdt(ig,jg)-(dt*lamb/(2*K))*[(eb0(kg)+eb1(kg))/2 * fff(kl,il,jl)]-...
        (alfba*dt/2)*((a0(kg)+a1(kg))/2)*fff(kl,il,jl);
        %%
    end
end
end
end %fecha o for dos triangulos
%
% Resolvendo para a alga 2
%
dirb=bdt*b0+dt*nlb;
dirb=sparse(dirb);
bet=sparse(bet);
%
for i=1:nn
    if (i==97|(i>287 & i<312)|i>589)
        bet(i,i)=1;
    end
end
end
b1=bet\(dirb);
%
end %fecha o for da iteracao nao-linear
%%
% Novas aproximacoes iniciais
p0=p1;
a0=a1;
e0=e1;
b0=b1;
eb0=eb1;
%
%salva automaticamente os graficos de cada populacao a cada 100 iteracoes
if mod(it,100)==0
    valor=it/100;
    valor=num2str(valor);
    nomep=strcat('6_poluente-',valor);
    figure(2)
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),p0), title('poluente'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    print( gcf, '-djpeg', nomep )
    %
    nomea=strcat('6_alga1-',valor);
    figure(3)
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),a0), title('algas 1'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    print( gcf, '-djpeg', nomea )
    %
    nomeb=strcat('6_alga2-',valor);
    figure(4)
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),b0), title('algas 2'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    print( gcf, '-djpeg', nomeb )
    %
    nomee=strcat('6_esporo1-',valor);
    figure(5)
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),e0), title('celulas de reproducao 1'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;

```

```

    print( gcf, '-djpeg', nomee )
    %
    nomeeb=strcat('6_esporo2-',valor);
    figure(6)
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),eb0), title('celulas de reproducao 2'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    print( gcf, '-djpeg', nomeeb )
end
%
%plota os graficos de cada populacao a cada 2 iteracoes
if mod(it,2)==0
    figure(1)
    subplot(3,2,1);
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),p0), title('poluente'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    subplot(3,2,3);
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),a0), title('algas 1'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    subplot(3,2,5);
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),e0), title('celulas de reproducao 1'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    subplot(3,2,4);
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),b0), title('algas 2'), view(0,90),...
    colorbar, shading interp;
    subplot(3,2,6);
    trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),eb0), title('celulas de reproducao 2'), view(0,90),colorbar, shading interp;
    pause(0.1);
end
disp('fim da iteracao');
disp(it);
end
t1=clock;
disp(t0);
disp(t1);

```