Comportamento Evolutivo de Descarga de Água de Produção Decorrente de Atividade Offshore: Tratamento Numérico e Simulação Computacional

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corregida e defendida por Julio César Saavedra Vásquez e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 25 de fevereiro de 2005

Prof. Dr.: João F. da Costa A. Meyer

Banca Examinadora

- Rodney C. Bassanezi
- Laercio Luis Vendite
- Jurandir Zullo
- Mauro Cirano

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Matemática Aplicada. Tese de Doutorado defendida em 25 de fevereiro de 2005 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.

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



Prof. (a). Dr (a). LAÉRCIO LUÍS VENDITE

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

mis

Prof. (a) Dr. (a)

Science or providence of the second science of the second science of the	
UNIDAGE BC	
DE CHAMADA	
+IUNICAMP	~~
and the second s	aminina and
VEX	- NHECK
TOMEO BCI 63164	1000090045
PROS. 16-P-00086	-05
ि 🗌 ः 🗹	
PRECO MOO	av pillone
DATA 15104 10	5
Nº CPD	

BIBID - 348417

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP

Bibliotecário: Miriam Cristina Alves - CRB8a / 5094

Saandra > Vásquez, Julio César Saavedraalde ¥444€ Comportamento evolutivo de descarga de água de produção decorrente de atividade offshore: tratamento numérico e simulação computacional / Julio César Saavedra Vásquez -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2005. Orientador : João Frederico da Costa Azevedo Meyer Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. 1. Método dos elementos finitos. 2. Equação diferencial parcial. 3. Galerkin, Métodos de. 4. Água - Poluição. I. Meyer, João Frederico da Costas Azevedo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Evolutionary behavior of dispersal process of produced water resultant from Offshore activities: numerical treatment and computational Palavras-chave em inglês (keywords): 1. Finite elements methods. 2. Partial differential equation. 3. Galerkin methods. 4. Water - Polution Área de concentração: Ecologia matemática Titulação: Doutor em matemática

Banca examinadora: Prof. Dr. Rodney Carlos Bassanezi Prof. Dr. Laércio Luís Vendite Prof. Dr. Jurandir Zullo Junior Prof. Dr. Mauro Cirano Data da defesa: 25/02/2005

À minha mãe Grimilda, pelos anos de sacrifício e dedicação aos seus filhos.

.

Agradecimentos

Meus mais sinceros agradecimentos ao meu orientador e amigo João Frederico Meyer, pelo seu sempre cordial atendimento e suas oportunas e ponderadas sugestões. Aos colegas e amigos do Densis e da Biomatemática em especial ao Cantão pelas dicas e o apoio.

À minha família pelo carinho, constante motivação e confiança.

À Carolina pelo sua inesgotável compreensão, e aos meus filhos pelos dias de sacrifício.

Aos amigos Armando, Lalo, César, Ludwig, e, que junto comigo compartilharam momentos apremiantes, bem como de muita alegría.

Ao Anibal pelas suas contribuições no que concerne ao aspecto computacional.

Aos meus amigos Elmo, Nelson e Joelmir com os quais comparti diversas facetas da vida.

Aos professores do IMECC pelo valioso aporte acadêmico.

Agradeço à Vice-reitoria de Pesquisa e de Pós-graduação da UCG, que me concedeu a licença integral para realizar este curso. Ao CNPq, que pelo suporte financeiro durante o decorrer deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho, é analisado o comportamento transiente da dispersão de água produzida decorrente da atividade *offshore*, através de simulação numérica. O processo de dispersão é modelado através de um sistema de Equações Diferenciais Parciais que reúne as equações clássicas de Stokes e de Difusão-advecção/reação em 3D, sendo que as velocidades obtidas na resolução numérica da I equação são usadas como parâmetro na equação de Difusão. Uma vez verificada existência e unicidade da solução da formulação variacional, são aplicados os métodos SUPG(de ordem II) e Crank-Nicolson, que correspondem a métodos de elementos finitos no espaço e diferenças finitas no tempo respectivamente, para achar uma solução aproximada do problema original. Adicionalmente estabelecemos algumas estimativas do erro induzido pelo método de Galerkin tanto no caso contínuo como no discreto no tempo.

Finalmente incluimos a implementação de um programa computacional o qual, através de diversas simulações de diferentes cenários, permite ilustrar a capacidade qualitativa do modelo e sua abordagem computacional.

Abstract

In this work we study the evolutionary behavior of dispersal process of produced water resultant from off-shore activities, using a system of the classic partial differential equations to model both a circulation map as well as diffusion and advection in a three-dimensional domain. An existence and uniqueness result is obtained in the studied case, where finite elements are used in spatial discretization and finite differences in the Crank-Nicolson form are used for time steps. A Streamline-upwind/Petrov-Galerkin II adaptation is used for obtaining the necessary numerical approximations. Error estimates are established for Galerkin's method in both the continuous and discrete cases. An algorithm is presented with which several scenarios were carried out and discussed, illustrating qualitative merits of the process and its computational expression.

Sumário

R	esun	10	iii
A	bstra	act	iii
Li	ista d	de Figuras	vi
\mathbf{Li}	ista o	de Tabelas	vii
N	otaçi	ões	viii
In	itrod	ução	1
1	O f	enômeno, um modelo e sua aplicação	5
	1.1	Produção offshore	5
		1.1.1 Impactos ao meio aquático durante a fase de operação	6
	1.2	Água de produção: O problema	8
		1.2.1 Métodos de tratamento da água de produção	11
		1.2.2 Monitoramento da qualidade da água de produção	12
		1.2.3 Impacto no ambiente marinho	13
	1.3	Um modelo clássico de dispersão	15
		1.3.1 O fluxo J	15
		1.3.2 Degradação	16
		1.3.3 Fontes	16
	1.4	A situação a ser analisada	17
2	For	mulação variacional	21
	2.1	Hipóteses de trabalho para o modelo adotado	21
	2.2	A formulação variacional ou fraca	22
	2.3	Existência e unicidade da solução fraca	24
3	Dis	cretização do problema	28
	3.1	Discretização espaço-temporal	28
		3.1.1 As funções base e a discretização do domínio	30

	3.2	SUPG	([,	32			
	3.3	Implei	mentação	34			
		3.3.1	A Malha	34			
		3.3.2	Campo de velocidades	34			
		3.3.3	Condições iniciais e a fonte	36			
4	Gal	erkin o	contínuo e Crank-Nicolson: Estimativas de erro	38			
	4.1	Galer	kin contínuo	39			
	4.2	Crank	-Nicolson	44			
5	RE	SULTA	ADOS: Cenários e simulações	50			
	5.1	Os par	râmetros	50			
		5.1.1	Parâmetros da discretização espacial	51			
		5.1.2	Parâmetros do modelo	51			
		5.1.3	Campos de velocidades	52			
	5.2	Disper	rsão de óleo: Cenário 1	53			
	0	5.2.1	Comentários dos resultados do cenário 1	53			
	5.3	Disper	rsão de hidrocarbonetos poliaromáticos				
	0.0	(PAHs	s): Cenário 2	55			
		5.3.1	Comentários dos resultados do cenário 2	56			
	5.4	Disper	rsão de metais pesados: Cenário 3	58			
	0.1	5.4.1	Comentários dos resultados do cenário 3	59			
6	Con	clusõe	S	61			
				_			
A	pênd	ice:Os	códigos numéricos	63			
Referências Bibliográficas							

Lista de Figuras

1	Fontes de poluição(%) \ldots	3
$1.1 \\ 1.2$	Água de produção: Descargas e reinjeção (m^3) no Mar do Norte. Fonte [30] Desenvolvimento histórico da razão água-óleo (m^3/m^3) no Mar do Norte.	8
	Fonte [30]	9
1.3	Domínio de atuação	18
3.1	Transformação afim $T: \hat{\Omega}_e \longrightarrow \Omega_e$	31
5.1	Esboço do campo que atua na fronteira do domínio Ω	52
5.2	Concentração de óleo disperso 1.1	54
5.3	Concentração de óleo disperso 1.2	55
5.4	Concentração de PAHs 2.1	57
5.5	Concentração de PAHs 2.2	58
5.6	Concentração de metais pesados 3.1	59
5.7	Concentração de metais pesados 3.2	60

.

Lista de Tabelas

1.1	Teor de metais pesados na água do mar e em águas produzidas no Mar do	
	Norte	10
1.2	Teor de compostos orgânicos presentes nas águas produzidas no Mar do	
	Norte	11
1.3	Teor de diferentes produtos químicos nas águas produzidas no Mar do Norte	11
1.4	Eficiência dos processos de tratamento na remoção de compostos dissolvi-	
	dos	13
5.1	Parâmetros da discretização espacial do domínio, conforme a Fig 1.3	51
5.2	Parâmetros utilizados na simulação do óleo disperso	53
5.3	Parâmetros dos PAHs	56
5.4	Parâmetros dos metais pesados	58

Notações:

- $L^p(\Omega) \longrightarrow$ espaço das funções mensuráveis em $\Omega,$ tal que $\int_{\Omega} |u|^p d\Omega < \infty, 1 \le p < \infty$
- $H^1(\Omega) \longrightarrow$ espaço de Sobolev
- $V \longrightarrow$ espaço de funções teste
- $(\cdot, \cdot) \longrightarrow \text{produto interno}$
- $\|\cdot\|_E \longrightarrow$ norma do espaço E

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

- $DivV \longrightarrow$ Divergente do campo V
- $q.t.p \longrightarrow$ em quase todo ponto
- $\alpha \longrightarrow$ coeficiente de difusão
- $\sigma \longrightarrow {\rm coeficiente}$ de degradação
- $k \longrightarrow$ coeficiente de permeabilidade do meio.
- **PAH** Hidrocarboneto Policíclico Aromático
- $ppm \longrightarrow partes por milhão$
- **PARCOM** \rightarrow Paris Commission on Operational Pollution
- **EPA** \longrightarrow Environmental Protection Agency
- $\mathbf{CONAMA} \longrightarrow \mathbf{Conselho}$ Nacional do Meio Ambiente
- $\mathbf{TOG} \longrightarrow \mathbf{Teor} \ \mathrm{de} \ \mathrm{\acute{o}leo} \ \mathrm{e} \ \mathrm{graxas}$
- $\mathbf{TPB} \longrightarrow$ Toneladas de porte bruto (tonelagem total que pode ser embarcada em um navio)
- boe \longrightarrow Barril de óleo equivalente, unidade que permite comparar (converter), em equivalência térmica, um volume de gás natural com um volume de óleo
- **VLCC** \longrightarrow Very Large Crude Carrier
- **ULCC** \longrightarrow Ultra Large Crude Carrier

Introdução

Os efeitos da poluição terrestre vêm sendo avaliados há muito tempo e, de modo mais intenso, nas últimas décadas. A poluição marinha só foi motivo de mais intensa preocupação mundial recentemente. Por séculos a exploração dos recursos dos oceanos tinha como principal propósito expandir nossos horizontes e domínios.

Dentre as substâncias poluentes despejadas ou injetadas no oceano, estão o petróleo e seus derivados, que podem ingressar no mar de maneira sistemática ou acidental, através de diversas fontes.

Para analisar o impacto de poluentes em ambientes marinhos devemos distinguir dois conceitos básicos:

Contaminação

É a presença de concentrações elevadas de substâncias na água, sedimentos ou organismos, cuja presença superam os níveis naturais para uma determinada área e um organismo específico.

Poluição

É a introdução direta ou indireta pelo homem, de substâncias ou energia no ambiente marinho (incluindo estuários) que resulte em efeitos danosos para os recursos naturais e para a saúde humana, no impedimento das atividades econômicas como a pesca e o turismo, na diminuição da qualidade da água, e na redução de ecossistemas naturais.

Fontes de introdução de óleo no mar

A poluição marinha através de óleo tem sua origem nas fontes naturais e fontes antropogênicas. Na primeira, o óleo entra naturalmente no meio marinho através de escapes submarinos decorrentes de processos geológicos tectônicos, ou pela erosão de rochas sedimentares provocadas por rios ou correntes submarinas.

A exploração, produção, transporte, refino e consumo do petróleo constituem as fontes antropogênicas, que desencadeiam lamentáveis fontes de introdução de óleo no mar; Operações de perfuração; despejo das águas de produção, acidentes e operação negligente durante o carregamento e descarregamento de petróleo (são mais comuns); colisões e naufrágios resultando na perda de carga; lavagem dos tanques de petróleo com água do mar, e o transporte atmosférico dos seus componentes mais voláteis. Em derramamentos de óleo, por exemplo, pode-se classificar a poluição marinha em função das características de cada acidente: poluição crônica ou aguda. Diz-se que há uma poluição crônica quando há o lançamento de pequenas quantidades de poluentes no mar, continuamente. E aguda, quando grandes quantidades de poluentes são despejadas num espaço relativamente curto de tempo. A poluição crônica proveniente das operações rotineiras dos navios representa muito mais perigo para o meio ambiente do que a poluição aguda dos acidentes. Entretanto, a preocupação com este último tipo não pode ser negligenciada, já que a cada ano para se reduzir custos aumenta-se o tamanho dos petroleiros e o volume de óleo transportado. Atualmente temos os VLCC e os ULCC (ver notações) que transportam acima de 200.000 TPB e 400.000 TPB respectivamente [26].

A prospecção e a exploração do petróleo se realizam nas bacias sedimentares as quais podem estar localizadas tanto em ambiente continental (bacia sedimentar continental) quanto marinho (bacia sedimentar marinha) [15]. No caso da exploração marinha, antes de se atingir o sedimento a ser perfurado, há uma profundidade a ser vencida (lâmina de água) que pode variar de acordo com a localização da bacia podendo ser de dezenas de metros (águas rasas), centenas de metros (águas profundas: entre 180 e 400 m) ou até alguns milhares de metros (águas ultra profundas: profundidade superior a 400 m). Quando a exploração do petróleo se dá em mar aberto, esta exploração é chamada de offshore; já quando esta acontece próximo da linha da costa, é denominada onshore. Para a produção de Petróleo utilizam-se plataformas fixas e flutuantes, as primeiras utilizadas na produção em águas pouco profundas e as últimas em campos de maior profundidade.

No final dos anos 80, a Petrobrás venceu o desafio de produzir petróleo em águas de mais de 500 metros de profundidade, feito não conseguido até então por nenhuma companhia do mundo. Em 1999 atingiu a profundidade recorde de 1.853 metros no campo de Roncador, na bacia de Campos. Apesar disto, a escalada não parou pois a empresa se prepara para superar, mais uma vez, seus próprios limites sendo a meta chegar aos 3 mil metros de profundidade ainda nesta década.

Até 2003, das 96 plataformas que operavam no Brasil, 74 eram fixas e as 22 restantes flutuantes [28], situando-se entre os paises que possuem maior número de plataformas. Estão localizadas no litoral dos estados do Ceará, Rio Grande do Norte, Alagoas, Sergipe, Bahia, Espírito Santo, Rio de Janeiro, São Paulo e Paraná.

Apesar de espetaculares e de receberem muita atenção pública, os acidentes representam apenas uma parcela do total de óleo derramado no mar. De fato, por volta do final dos anos 80, ficou reconhecido que, as operações rotineiras contribuíam com a maior parte do volume de óleo introduzido nos oceanos, e representavam muito mais perigo às praias e à biota do que a quota anual dos grandes acidentes. A figura abaixo permite ter uma melhor idéia acerca disto.

Apesar das atividades offshore ocorrerem longe da costa, a poluição decorrente delas



Figura 1: Fontes de poluição(%)

gera alterações significativas da qualidade ambiental. Principalmente o sufocamento do assoalho oceânico com alterações das comunidades bentônicas.

As atividades de produção de óleo resultam na produção de uma material impactante denominado água de produção (ver cap. 1, seção 1.2). Os efeitos que o descarte desta água produzida provoca sobre a biota ainda são pouco conhecidos, sendo um tema muito importante e motivo de intensa pesquisa e no Brasil ainda há pouca avaliação a respeito. Na tentativa de poder auxiliar a uma melhor compreensão deste problema é que resolvemos analisá-lo através de um modelo matemático que modela o comportamento espaço-temporal da concentração de algumas destas substâncias contaminantes no meio ambiente.

De acordo com Gomes, existem três abordagens complementares para determinar a existência de impactos ambientais: a mensuração de concentrações de poluentes no meio físico (água e sedimento) e biótico (bioacumulação); os estudos de laboratório ou de campo que visam estabelecer a existência de respostas toxicológicas dos organismos aos poluentes; e os estudos de campo sobre modificações na estrutura e processos dos ecossistemas. Em concordância com esta classificação, podemos dizer que este trabalho se enquadra na primeira abordagem e, em particular, no que concerne o meio físico. Tem como objetivo principal a previsão do destino de alguns dos componentes do efluente em questão. Para tal através, de uma abordagem tridimensional modelamos e simulamos o comportamento transiente das concentrações das principais substâncias poluentes presentes na água de produção após seu despejo no mar. A modelagem do processo de dispersão da pluma congrega uma E.D.P e as equações de Stokes. A solução numérica desta última permite simular o campo de velocidades sob o qual estão submetidos os diversos compostos deste efluente. Tanto o campo de velocidades como os parâmetros associados aos processos de difusão, degradação são incorporados na E.D.P. cuja solução numérica é obtida através do método de elementos finitos ao igual que no caso das equações de Stokes. As simulações dos diferentes cenários obtidas por médio de um programa que nós implementamos em ambiente MatLab, pretendem mostrar a capacidade preditiva deste trabalho tanto na natureza qualitativa quanto na quantitativa. Desta forma, pretendemos que os resultados deste trabalho venham contribuir como instrumento adicional de suporte tanto a nível operacional quanto a nível de fiscalização por parte da instituição exploradora de petróleo e as entidades fiscalizadoras do meio ambiente.

Uma descrição completa do problema da descarga da água produzida, devida à atividade *offshore*, é realizada no capítulo 1 deste trabalho. Neste mesmo capítulo é apresentada uma modelagem clássica, via um sistema de equações diferenciais parciais combinando a circulação com processos de difusão-advecção sendo que esta última é amplamente utilizada para modelar fenômenos que envolvem processos de dispersão, a mesma que será utilizada para modelar o comportamento espaço-temporal das diferentes substâncias que constituem a descarga de água de produção.

No capítulo 2 é abordada a formulação variacional ou fraca associada ao modelo, como uma alternativa adequada para uma formulação que permita resolvê-lo numericamente, uma vez verificadas existência e unicidade da solução neste novo quadro teórico.

Verificadas a existência e a unicidade de solução, no capítulo 3, é aplicado o método de Galerkin (via elementos finitos) na discretização espacial e o método de diferenças finitas do tipo Crank Nicolson na discretização temporal. Ainda neste capítulo é discutida a necessidade de introduzirmos o método SUPG II com o propósito de evitarmos as oscilações inerentes às soluções numéricas em determinadas condições.

Após efetuarmos a resolução aproximada do problema variacional, no capítulo 4, realizamos algumas estimativas do erro cometido a *priori* quando efetuamos a discretização atráves do método de Galerkin tanto no caso contínuo como no discreto.

O capítulo 5 é destinado à discussão dos resultados de algumas das diversas simulações numéricas de possíveis cenários para as substâncias mais representativas presentes na descarga da água produzida. Os correspondentes resultados e suas respectivas conclusões são realizados no último capítulo.

Capítulo 1

O fenômeno, um modelo e sua aplicação

Este capítulo apresenta uma descrição sucinta do problema bem como várias referências a trabalhos relativos ao impacto ambiental causado durante toda a fase de produção do petróleo. Também é apresentada uma das E.D.P. que é amplamente utilizada na modelagem de fenômenos que envolvem processos de dispersão.

1.1 Produção offshore

Na década dos 60 o Brasil presenciou dois importantes acontecimentos na atividade de produção: foi atingida a meta de 100 mil barris diários de produção em 1962, e a primeira descoberta de petróleo no mar, em 1968. O campo de Guaricema, no litoral de Sergipe, representou um passo importante para que a Petrobrás mergulhasse em direção ao futuro sucesso exploratório em atividades offshore. Depois de Guaricema, foram realizadas mais de 20 descobertas de pequeno e médio portes no litoral de vários estados [27]. Os anos 70 também foram marcados por crises. Os países da Organização dos Países Exportadores de Petróleo (OPEP) elevaram substancialmente os precos internacionais, provocando os chamados choques do petróleo de 1973 e 1979. Com isso, o mercado tornou-se conturbado e marcado por incertezas não apenas quanto aos preços, mas também quanto à garantia do suprimento. A resposta do Brasil a estes acontecimentos, entre outras medidas¹, foi um crescente aumento na exploração e produção de petróleo. De acordo com os dados estátisticos que aparecem em [27], no final de 1999 as reservas de petróleo e gás da Petrobrás chegaram a 17,3 mil milhões de boe, 14% dos quais em terra firme, 11% em águas pouco profundas e 25% em águas profundas. Os 50% restantes se encontravam em águas ultraprofundas. Assim, as reservas equivalentes de petróleo e gás da companhia em águas profundas e ultraprofundas representavam 75% do total das reservas.

¹programas de conservação/economia de combustíveis e energias renováveis (energia solar e álcool)

A exploração e a produção do petróleo em águas profundas se dá através da implantação e operação da unidade. Durante a fase de implantação utilizam-se estruturas flutuantes ancoradas no fundo marinho, através de linhas de escoamento ou dutos e outras estruturas as quais são lançadas e fixadas sobre o assoalho marinho. Tanto as atividades decorrentes da fase de implantação como as da fase de operação da unidade provocam impactos nos meios físico e biótico.

O revolvimento dos sedimentos (lama e argila) provocado pela fase de implantação, forma uma nuvem de material que fica em suspensão por várias horas e atinge uma região de vários km^2 , dependendo das condições locais de momento e das dimensões da estrutura petrolífera. Este fenômeno é responsável principalmente pela morte de organismos de populações bentônicas, apesar destas se recuperarem em relativamente pouco tempo. A este efeito soma-se o aumento na concentração de alguns nutrientes decorrentes do descarte de esgotos sanitários ainda que previamente tratados (por oxidação) na unidade, conjuntamente com os efluentes de cozinha e limpeza. Eventualmente o lançamento destes resíduos pode introduzir agentes patogênicos (virus e bactérias) nas águas locais. Dependendo da proximidade da costa isto pode representar um risco para seres humanos através de contato direto.

Como já foi comentado, as diferentes atividades durante a fase de operação da unidade também são responsáveis pelo elevado potencial de risco de poluição e contaminação. Para um maior entendimento do grau do impacto e sua abrangência, vamos comentar brevemente os efeitos nocivos causados ao meio ambiente aquático por cada uma destas.

1.1.1 Impactos ao meio aquático durante a fase de operação

Em primeiro lugar, a própria presença da estrutura física provoca o desenvolvimento de comunidades biológicas que não pertencem ao ecossistema. Em parte, essas espécies são transportadas nos cascos das embarcações (e nas águas de lastro), devido ao intenso trânsito de embarcações nas proximidades de unidades de produção, para efeitos de embarque desembarque de pessoal, cargas ou resíduos. Porém esta atividade representa um risco potencial de acidentes que podem ter como conseqüência o derrame no mar dessas cargas transportadas, dentre as quais figuram principalmente o álcool etílico, trietilenoglicol (TEG) é sequestrante de oxigênio que, apesar dos baixos volumes, são bastantes agressivas ao meio ambiente.

Novamente, o descarte de efluentes líquidos, tanto de esgoto sanitário como de águas utilizadas no resfriamento dos equipamentos da unidade fazem parte deste quadro. O descarte de águas usadas no sistema de resfriamento provoca também um aumento na temperatura das águas marinhas que podem não ter impacto significativo desde que lançadas ao mar de modo adequadamente projetado. As águas servidas geradas na unidade, devido à lavagem da planta industrial, peças e equipamentos, por exemplo, bem como aquelas associadas às chuvas, contêm resíduos oleosos e, após coletadas, são tratadas nos sistemas de hidrociclones da unidade antes de serem despejadas no mar. De acordo com a legislação ambiental brasileira, este efluente final precisa ter uma concentração de óleo e graxa inferior a 20mg/l para poder ser despejado.

Além dos efluentes líquidos citados acima, temos a água de produção propriamente dita, que é constituida de uma água de formação natural presente nos reservatórios de óleo e gás, constituída por compostos orgânicos e inorgânicos incorporados ao longo de sua formação geológica, bem como eventuais contribuições decorrentes de processos de intervenção nos poços durante o período de produção. Seus principais constituintes são sais inorgânicos, hidrocarbonetos e elementos metálicos presentes em concentrações bastante variáveis [22], [24] e [29].

O lançamento contínuo de contaminantes associados à água de produção leva a alterações nas características fisíco-químicas da água, região circunscrita chegando a centenas de metros de distância da unidade e na direção das correntes marinhas predominantes, com um forte potencial de influência à biota.

A queima de gás natural (e outros combustíveis), a produção, o transporte e o armazenamento do petróleo constituem atividades altamente poluentes no meio aquático. Durante a fase de operação, a principal fonte que gera emissões gasosas é a queima de gás natural o que gera emissões contendo hidrocarbonetos, CO, SOx e NOx cuja dispersão se vê comprometida quando são geradas significativas emissões devidas à alta pressão em que o equipamento funciona.

O transporte de petróleo é também uma das atividades de maior impacto ambiental, podendo ocorrer no sistema submerso de produção, nas linhas de transferência de óleo e gás, na unidade de produção e estocagem ou, ainda, no navio que transporta o petróleo.

No caso específico de acidentes de derrame de petróleo, existem muitos trabalhos de pesquisa dedicados a este assunto. Em [2], Cantão faz a modelagem e simulação numérica de derrames de óleo no Canal de São Sebastião, SP. Assumindo um campo de correntes constante no tempo e interpolando em duas dimensões valores pontuais de velocidades, o autor obtem um perfil hidrodinâmico aproximado do Canal com o qual faz a implementação do seu programa de um modelo bidimensional. Na tese de doutorado de Oliveira [6], o campo de velocidades é obtido usando a resolução aproximada da equação de Stokes via métodos de elementos finitos de ordem II (com SUPG). Modela com sucesso o comportamento evolutivo de manchas de óleo na Bahia de Ilha Grande, RJ. Nestes trabalhos, o uso de um modelo bidimensional justifica-se uma vez que são aplicados no processo de dispersão viscosa ou durante a segunda fase como definida por Fay (*in* Cantão

[2]).

Além destas fontes de introdução de óleo no mar, o lastreamento e as operações em terminais² constituem atividades que poluem o mar de forma sistemática ou acidental.

1.2 Água de produção: O problema

Como resultado do processo de separação do óleo, gás e água numa instalação de produção obtem-se a denominada água de produção (ou água produzida), que é tipicamente uma mistura de água de formação e água de injeção. Do volume total de água de produção gerado pela unidade de produção, uma parte é reinjetada para manter a pressão do reservatório e a outra parte, após tratamento, é descartada no mar. Apesar do tratamento que estes efluentes recebem antes de serem lançados no mar, podem conter um teor residual de óleo e graxas e outros contaminantes bem acima dos padrões especificados pela legislaçao ambiental (20 mg/l). Desta forma, a continuidade operacional da unidade e a quantidade final de óleo recuperado dependem diretamente do custo do tratamento desta água. As



Figura 1.1: Água de produção: Descargas e reinjeção (m^3) no Mar do Norte. Fonte [30]

propriedades físicas e volumes da água de produção variam consideravelmente durante toda a vida do reservatório. A razão água-óleo incrementa-se durante a vida produtiva do

²operações de carga e descarga de óleo, docagem para reparos e efluentes da Casa de Máquinas.

campo [29] (ver Figura 1.1) o que acarreta um significativo custo na produção de óleo ou gás. Neste mesmo trabalho, os autores enfatizam que as descargas de águas de produção de plataformas de gás são dez vezes mais tóxicas que as descargas de água de produção de plataformas de petróleo. Porém os volumes de água produzida no primeiro caso são muito menores de tal forma que o impacto total pode até ser menor. A água produzida será



Figura 1.2: Desenvolvimento histórico da razão água-óle
o (m^3/m^3) no Mar do Norte. Fonte[30]

aquecida pela temperatura do reservatório $(96^{\circ}C)$ e portanto quando esta for despejada no mar estará mais quente que a água do mar. Além disso é mais salina do que a água do mar e em geral contém óleo, graxas, compostos químicos (aditivos), compostos orgânicos e inorgânicos dissolvidos ou dispersos. Dentre os compostos dissolvidos temos:

Compostos Inorgânicos

Diferentes concentrações de Cátions $(Na^+, K^+, Ca^{2+}, Mg^{2+}, Ba^{2+}, Sr^{2+}, Fe^{2+})$ e ânions ($Cl^-, SO_4^{2-}, CO_3^{2-}, HCO_3^-$) estão presentes na constituição da águas produzidas, sendo estes íons responsáveis pelo potencial de incrustação destas águas [7]. Neste mesmo trabalho De Oliveira reitera que, além destes íons, encontram-se presentes traços de vários metais pesados, tais como Mercúrio, Cádmio, Chumbo, Níquel e Prata. A tabela 1.2 que aparece nesse mesmo trabalho³ mostra as concentrações típicas de diferentes metais pesados dissolvidos nas águas produzidas nos campos de petróleo e gás do Mar do Norte. A quantidade total (kg) destes metais pesados introduzida no mar anualmente pode ser estimada com base em sua concentração na água produzida e pelos volumes desses efluentes despejados no mar durante o ano.

 $^{^{3}\}mathrm{De}$ autoria de Hansen e Davies

	Teor de metais pesados $(\mu g/l)$				
Metal	Água P	roduzida	Água do Mar		
-	Típica	Faixa	Típica		
Cádmio	50	0-100	0,02		
Cromo	100	0-390	0,001		
Cobre	800	1-1500	0,2		
Chumbo	500	0-1500	0,03		
Mercúrio	3	0-10	0,001		
Níquel	900	0-1700	0,3		
Prata	80	0-150	0,3		
Zinco	1000	0-5000	0,6		

Bol. Téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, 43(2):129-136, abr./jun.2000

Tabela 1.1: Teor de metais pesados na água do mar e em águas produzidas no Mar do Norte.

Compostos Orgânicos

Os ácidos carboxílicos são os que predominam na composição orgânica da água produzida e correspondem a mais de 90% do total de compostos orgânicos presentes nas descargas de água de produção. Estes são altamente voláteis, principalmente os ácidos como o fórmico e acético.

Em segunda maior proporção estão o benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno (BTEX) e o naftaleno, compostos aromáticos relativamente solúveis na água da mesma forma que os compostos polares tais como os fenóis que também fazem parte da composição orgânica da água produzida. Ainda temos, em menor proporção, os compostos policíclicos aromáticos (PAHs) e alifáticos, também conhecidos como hidrocarbonetos. Segundo [7], os compostos alifáticos mais leves ($< C_5$) são de muito interesse pois são mais solúveis em água e contribuem para o total de carbono orgânico volátil.

A quantidade relativa e a distribuição de peso molecular dos compostos orgânicos variam de poço para poço. A tabela 1.2 permite ter uma idéia das concentrações destes compostos.

Compostos orgânicos muito solúveis na água de produção são aqueles de baixo peso molecular $(C_2 - C_5)$, tais como os ácidos carboxílicos e álcoois. Em algumas águas produzidas a concentração desses componentes pode ser maior que 5000 ppm. Hidrocarbonetos de médio e alto peso molecular $(C_6 - C_{15})$ constituem componentes parcialmente solúveis; em poucas concentrações sua solubilidade é favorecida, porém não são tão solúveis quanto os de baixo peso molecular, ver [29].

Constituintes	Campo d	e Petróleo (mg/l)	Campo de Gás (mg/l)		
	Típico	Faixa	Típico	Faixa	
$\operatorname{Alifáticos}(< C_5)$	1	0-6	1	0-6	
$\operatorname{Alifáticos}(>C_5)$	5	0-30	10	0-60	
Aromáticos	8	0-20	25	0-50	
Naftalenos	1,5	0-4	1,5	0-4	
Fenóis	5	1-11	5	0-22	
Ácidos Graxos	300	30-800	-		

Bol. Téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, 43(2):129-136, abr./jun.2000

Tabela 1.2: Teor de compostos orgânicos presentes nas águas produzidas no Mar do Norte

Além dos compostos naturalmente presentes nas águas de produção, uma grande variedade de produtos químicos é adicionada para resolver ou prevenir problemas operacionais.

Produtos Químicos

Como estes aditivos (ver tabela 1.3) são de aplicação específica para cada sistema de produção, gerarão, desta forma, efluentes com diferentes características físico-químicas. Embora estes produtos químicos sejam necessários na fase inicial da produção, tornam-se complicações no processo de tratamento da água de produção.

Produto Químico	Campo de Petróleo(mg/l)		Campo de Gás(mg/l)		
	Típico	Faixa	Típico	Faixa	
Inibidor de Corrosão	4	2-10	4	2-10	
Inibidor de Incrustação	10	2-10			
Desemulsificante	1	0-2	-		
Polieletrólito	2	0-10			
Metanol			2000	1000-15000	
Glicol			1000	500-2000	

Bol. Téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, 43(2):129-136, abr./jun.2000

Tabela 1.3: Teor de diferentes produtos químicos nas águas produzidas no Mar do Norte

Os inibidores de corrosão e limpadores de oxigênio reduzem a corrosão do equipamento; já os coagulantes e floculantes permitem a remoção de componentes sólidos.

1.2.1 Métodos de tratamento da água de produção

Após o processo de separação gravitacional⁴, a água produzida ainda possui um elevado teor de hidrocarbonetos que devem ser removidos antes do seu despejo no mar. Para tal

⁴através de separadores bifásicos, trifásicos e/ou tanques de decantação.

aplicam-se métodos diferenciados para remover compostos dispersos e compostos dissolvidos. A eficiência destas tecnologias de tratamento de águas de produção depende dos volumes envolvidos, da constituição da água, e do espaço físico no caso de instalações *offshore*. No entanto, sua viabilidade fica condicionada aos custos operacionais.

A aplicação simultânea de processos como sistemas de filtração em meio granular, vasos gravitacionais, flotação de gás induzido ou dissolvido, centrifugação e o uso de hidrociclones permitem uma maior eficiência na separação dos compostos dispersos.

Os danos mais severos causados ao meio aquático devem-se aos compostos dissolvidos, e por causa disto existem varias técnicas para a remoção de alguns destes compostos. A precipitação química e a troca iônica (TI) são aplicadas para a remoção de metais pesados (como o Cádmio, Cobre, Níquel e Cromo). Já a remoção dos produtos químicos e material orgânico dissolvidos na água se realiza através da aplicação de métodos como:

- 1. Tratamento Biológico (TB)
- 2. Filtração por Membrana (FM)
- 3. Absorção em Zeólitos Sintéticos
- 4. Carbono Ativado Granulado (GAC) e
- 5. Stripping com Gás

Estes procedimentos estão descritos em [7]. Ainda nesse trabalho, a autora, com base na tabela 1.4, conclui que apenas a aplicação conjunta de todos estes métodos garante a remoção dos diferentes contaminantes. Mas a adoção destes procedimentos só é economicamente viável nos campos produtores de gás onde os custos de instalação e operação são de 2,5 a 18 vezes menores do que os indicados para os campos produtores de petróleo.

1.2.2 Monitoramento da qualidade da água de produção

Uma forma de avaliar a eficiência dos tratamentos da água óleosa, brevemente comentados acima, é por meio da análise de amostras coletadas diariamente ao longo da planta de tratamento. Segundo Pereira [19], a coleta direta em pontos de amostragem convencionais tende a causar grandes alterações nas medidas do TOG e da distribuição do tamanho da gota do óleo disperso, parâmetros que caracterizam a qualidade da água de produção. Outra forma de se determinar a composição química marinha é baseada em aspectos biológicos, tal como a capacidade que determinados organismos têm para absorver e acumular substâncias presentes na água. Mexilhões e Moluscos Bivalvos têm sido utilizados para monitorar os níveis de hidrocarbonetos presentes na água, através de amostras colocadas em gaiolas em difererentes locais. Peixes capturados podem servir para este mesmo propósito, porém de acordo com [29], sua habilidade de transformar ou

	Eficiência de Remoção(%)						
Contaminante	TI	GAC	Zeólitos	FM	Stripping c/Gás	TB	Ox.p/ar umido
Metais Pesados	80	baixa	-	-			
$\operatorname{Alifáticos}(< C_5)$		10		-	95	baixa	100
Alifáti $\cos(\geq C_5)$	-	15	60	-	90	baixa	100
Aromáticos(BTX)	_	95	70	90	90	baixa	100
Naftalenos	-	95	70	10	90	baixa	100
Fenóis		95	40	15	1	14-30	100
Ácidos Graxos		30	baixa	_	baixa	77-90	100
Inibidor de Corrosão		20	baixa		baixa	baixa	100
Inibidor de Incrus.		20	baixa		baixa	baixa	
Desemulsificante	—	30	baixa	-	baixa	baixa	—
Polieletrólito	—	50	baixa	—	baixa	baixa	_
Metanol		n/a	baixa	-	5	80	100
Glicol		n/a	baixa		baixa	50	100

Bol. Téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, 43(2):129-136, abr./jun.2000

Tabela 1.4: Eficiência dos processos de tratamento na remoção de compostos dissolvidos

metabolizar rapidamente os PAHs provoca desvios na correlação da concentração neles presente com a concentração realmente presente na água.

1.2.3 Impacto no ambiente marinho

O impacto ambiental decorrente do descarte da água de produção é geralmente avaliado pela toxicidade dos constituintes e pela quantidade de compostos orgânicos e inorgânicos nela presentes. Dentre as substâncias de toxicidade mais elevada que fazem parte da lista de produtos proibidos da PARCOM estão o Mercúrio, o Cádmio e seus compostos [7]. O despejo da água produzida no Brasil é regulado pelo IBAMA/CONAMA que, de acordo com a resolução 20/86 em seu artigo 21, estabelece os limites de contaminantes em efluentes pelo método Gravimétrico. No caso de óleo e graxas, este limite é de 20 ppm(mg/l). Os atuais limites de TOG estabelecidos em 1993 pela EPA dos EUA são de 29 mg/l como média mensal e de 42 mg/l como limite máximo diário permitido. Apesar das restrições relativas ao TOG, o efeito contaminante das outras substâncias não pode ser negligenciado.

Óleo disperso

Se o óleo disperso através de pequenas gotas (4-6 microns) suspensas na fase aquosa entra em contato com o piso do oceano, pode causar sua contaminação por acumulação causando desta forma, distúrbios na comunidade bentônica. Por outro lado, de acordo com Stephenson 1992 (*cf. in* [29]), se esse óleo alcançar a superfície, provocará uma demanda biológica crescente de oxigênio perto do local de mistura.

Hidrocarbonetos

Os Hidrocarbonetos que não apresentam ligações múltiplas entre os átomos de carbono são chamados de compostos saturados, pois contêm o maior número possível de átomos de hidrogênio em um composto de carbono. Os hidrocarbonetos alifáticos pertencem a este grupo, e tendo um comportamento semelhante ao das graxas, podem ter sua concentração avaliada através do TOG. Não sendo este o caso dos hidrocarbonetos aromáticos que pertencem ao grupo dos compostos insaturados os quais do ponto de vista toxicológico são mais tóxicos que os alifáticos.

Compostos de peso molecular médio são mais tóxicos que os de alto peso molecular. Compostos de peso molecular baixo, apesar de serem altamente tóxicos e apresentarem alto risco de combustão, são geralmente considerados sem muita importância, pelo fato de serem altamente voláteis e se dispersarem rapidamente na atmosfera quando derramados no mar.

A toxicidade dos hidrocarbonetos ou os efeitos físicos do produto podem ser letais para os organismos aquáticos, ou sub-letais, quando os efeitos biológicos crônicos afetam o comportamento, crescimento, reprodução, colonização e distribuição das espécies. PAHs de baixo peso molecular são altamente tóxicos para organismos aquáticos e podem ser cancerigênos para humanos e animais. Em [29] afirma-se que todos são mutagênicos e prejudiciais para a reprodução. Moléculas de PAHs de alto peso são menos solúveis e estarão associadas com o óleo disperso. No caso de fenóis, apesar de serem rapidamente degradados por bactérias ou foto oxidação, provocam efeitos nocivos na reprodução de espécies.

Metais pesados

A idade e a formação geológica do campo determinam a concentração de metais. A concentração destes em águas produzidas é maior que nas água do mar. Porém seus impactos sobre organismos marinhos podem ser pouco significativos tanto devido à diluição que reduz a concentração quanto ao fato da forma dos metais absorvidos em sedimentos ser menos biodisponível para espécies marinhas do que os íons metálicos em solução. Além dos problemas de toxicidade, os metais podem interferir com o processo de produção do petróleo.

Metais como o Zinco, o Magnésio, o Cobalto e o Ferro em doses muito pequenas constituem micronutrientes para a maioria dos organismos vivos. Porém tornam-se tóxicos e perigosos para a saúde humana quando ultrapassam concentrações limite. Já no caso do Chumbo, do Mercúrio, do Cádmio, do Cromo e do Arsênio, são metais que não existem naturalmente em nenhum organismo. E não desempenham funções nutricionais ou bioquímicas em microorganismos, plantas ou animais. Portanto a presença desses metais em organismos vivos é prejudicial em qualquer concentração. O nível de contaminação e a velocidade de propagação dos constituintes da água produzida no ambiente marinho estão sujeitos à salinidade da água, ao regime de ventos e correntes marinhas, à composição dos poluentes e seu volume e à capacidade de absorção tanto dos organismos, como a do assoalho marinho.

O destino e os efeitos poluentes da água produzida após seu descarte no mar têm sido elemento motivador de muitos trabalhos de modelagem e de simulações numéricocomputacionais, especialmente no Mar do Norte onde a atividade offshore vem sendo intensamente praticada. Por exemplo, Rye *et al* [21] fazem uma simulação e conseqüente análise de sensibilidade da concentração do óleo disperso no Mar do Norte, através de um modelo tridimensional chamado PROVANN.

Washburn *et al* [31] estudam, por sua vez, a dispersão da água produzida próxima ao campo de extração no canal de Santa Barbara, na Califórnia, e isto é efetivado com um modelo de pluma flutuante.

1.3 Um modelo clássico de dispersão

Uma significativa variedade de fenômenos relativos a problemas ecológicos e ambientais (tais como Dinâmica de Populações ([20] e [18]) e Poluição Ambiental ([16] e [2])), podem ser modelados através de sistemas que incluem a E.D.P de Difusão-Advecção/Reação:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Div(fluxo) + Degradacao = fonte, \qquad (1.1)$$

que é obtida usando a lei de conservação das massas, onde $u(t, \mathbf{x})$, dependendo do modelo, pode representar diversos aspectos desde populações ou concentrações de espécies até a quantidade total de um material nesse meio.

1.3.1 O fluxo J

Fisicamente, a dispersão de uma substância num determinado meio é a ação conjunta dos processos:

Difusão

O movimento Browniano das moléculas de uma substância constitui a difusão microscópica. Esta, mais a difusão macroscópica devida à tensão superficial, constituem a difusão chamada de efetiva por Marchuk [16] ou por Okubo [20]. Pela lei de Fick assumimos que a matéria tem uma tendência a se espalhar de tal forma a ocupar o espaço físico da maneira mais regular possível, o que equivale a dizer que a matéria se movimenta de locais de maior concentração para os de menor concentração. Assim, é razoável supor que a variação da concentração se dá na clássica forma:

$$J_1(t, \mathbf{x}) = -\alpha(t, \mathbf{x}, u)\nabla u(t, \mathbf{x}),$$

Sendo o gradiente de u considerado apenas em relação às coordenadas espaciais. E $\alpha(t, \mathbf{x}, u)$ representa o valor da difusibilidade efetiva no meio, na posição \mathbf{x} e no instante t. É natural intuir que, em determinadas situações e em locais onde a concentração é maior, as partículas experimentem uma menor difusibilidade, daí que este parâmetro possa também depender da própria concentração $u = u(t, \mathbf{x})$.

Advecção

A advecção⁵ é o movimento provocado por agentes externos, como o campo de velocidades do meio. No nosso caso específico, correntes induzidas por forçantes tais como ventos e marés, etc.

Se o agente externo que provoca o movimento da substância é definido por um campo de velocidades V, em geral variável tanto na posição como no tempo, então o fluxo advectivo será proporcional à concentração:

$$J_2(t, \mathbf{x}) = V(t, \mathbf{x})u(t, \mathbf{x}).$$

Assim, o fluxo por difusão efetiva e transporte advectivo é dado por:

$$J(t, \mathbf{x}) = J_1(t, \mathbf{x}) + J_2(t, \mathbf{x}) = -\alpha(t, \mathbf{x})\nabla u(t, \mathbf{x}) + V(t, \mathbf{x})u(t, \mathbf{x}).$$

1.3.2 Degradação

A degradação é também conhecida como decaimento e, é um processo que ocorre a nível de partículas, constítuido pelas alterações sofridas pela substância ao longo do tempo devido entre outras causas, a fotodegradação, biodegradação e precipitação.

Em muitas situações, assume-se que a perda de substância é linearmente proporcional à própria quantidade presente no meio. No caso do óleo isto é aceitável no período que Fay chama de segunda fase, durante o comportamento difusivo-advectivo.

1.3.3 Fontes

Fontes e sorvedouros são os meios pelos quais a substância é introduzida e retirada do meio respectivamente. Por exemplo, os emissários (denominados no meio como dispersores) através dos quais é despejado o esgoto das cidades em meios aquáticos são um caso específico de uma fonte (poluente).

⁵Em alguns trabalhos a denominação adotada é a de "convecção"que, neste escopo, indica um transporte para o qual contribui aquilo que se difunde.

1.4 A situação a ser analisada

Devido às concentrações das diferentes substâncias químicas presentes na água de produção, os organismos expostos a essa água sofrem impactos de vários tipos. Os principais fatores que afetam os constituintes e as concentrações dessa solução e, portanto que regulam seu potencial de impacto sobre a biota, são:

- 1. Diluição da descarga dentro do ambiente receptor.
- 2. Precipitação instantânea e a longo prazo.
- 3. Volatilização de hidrocarbonetos de baixo peso molecular.
- 4. Biodegradação de compostos orgânicos em outros compostos químicos mais simples.

Estudos realizados por Rabalais *et al* (1992)(in [29]) sobre o destino e os efeitos do descarte da água de produção em ambientes costeiros no Golfo de México mostraram que a água produzida pode contaminar sedimentos e a região próxima tal que a contaminação correlaciona o volume de água produzida despejada com a concentração de hidrocarbonetos. Para operações *offshore*, os fatores-chave incluem a concentração e outras características dos constituintes, tais como toxicidade, bio-disponibilidade e a forma. Nesse mesmo trabalho, Rabalais *et al* afirmam que o destino real e os efeitos variam com o volume, a composição da descarga, a hidrologia e as características físicas do ambiente receptor.

Logo que a água de produção é despejada no mar, as diferentes substâncias presentes nela experimentam processos de dispersão e de biodegradação⁶, processos que, de acordo com as características desta atividade, acontecem devido ao fluxo, tanto pela difusão efetiva como por advecção (decorrente das correntes marinhas), e também devido à volatilização e à absorção respectivamente. Isto nos levou a utilizar a clássica e amplamente utilizada E.D.P. (1.1) para modelar este fenômeno na situação aqui considerada.

Como os efluentes da água de produção de uma unidade de produção irão afetar um volume de água do mar circunscrito às primeiras centenas metros de distância da unidade ([22] e [13]), cuja pluma se dispersará nas três dimensões, é plausível assumir que o domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ considerado é um paralepipedo, tal como o ilustra a Figura 1.3 (modificada de [15]).

Além disso, adotamos a seguir as seguintes notações:

 $u(t, \mathbf{x})$ representa a concentração de material presente na água de produção, na posição $\mathbf{x} \in \Omega \subset R^3$ no instante $t \in (0, T]$.

 $^{^{6}\}mathrm{exceto}$ metais pesados que não degradam



Figura 1.3: Domínio de atuação

 $\alpha = \alpha(t, \mathbf{x}, u)$ é a função que descreve a difusividade efetiva desse material.

 $W_1 = (w_1(\mathbf{x}, t), w_2(\mathbf{x}, t), w_3(\mathbf{x}, t))$ caracterizará o campo de velocidades do mar devido à circulação local, a marés e ventos. Denotamos com V a resultante da circulação local W_1 e o campo W_2 o qual é induzido pela natureza gravitatória das diferentes substâncias contaminantes que fazem seu ingresso no mar através da fonte f. Neste trabalho vamos considerar que a circulação local W_1 tem comportamento estacionário e, sendo assim, consideraremos esse campo apenas como função da variável espacial. Apesar disto, é possível considerar a influência das marés através de uma mudança nas condições de fronteira⁷ emulando a "variação temporal"da circulação local em torno da unidade *offshore*.

De acordo com as características da dispersão da água de produção haverá uma perda na concentração das substâncias que a constituem, tal como descrito antes, esta perda deve-se em parte, a fatores como infiltração e volatilização das substâncias através das fronteiras do domínio. Contudo, dentro do domínio de atuação existem fronteiras que, por estarem muito afastadas da fonte, não são atigindas pelas substâncias.

De um modo geral se denotamos com $\Gamma_N \subset \partial \Omega$ as fronteiras do oceano onde acontece a perda da substância e, então, esta é modelada através da condição

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} = k_N u, (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Gamma_N$$
(1.2)

Onde η é o vetor normal (unitário) exterior à superfície. Esta condição de tipo Robin, indica que a taxa de passagem de contaminante através da fronteira é suposta diretamente proporcional à concentração da própria substância. Neste caso, temos que $k_N = V \circ \eta$. No caso em que $k_{\Gamma_i} = 0$ temos que o fluxo através da fronteira Γ_i é nulo, i.e. não há perda nem ingresso da substância, e tem-se a condição de Von Neumann.

No caso das fronteiras nas quais não se registra a presença das substâncias poluentes temos a condição de Dirichlet homogênea:

$$u = 0, (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Gamma_D, \tag{1.3}$$

Desta forma, $\partial \Omega = \Gamma = \overline{\Gamma_N \bigcup \Gamma_D}$, com $\Gamma_N \bigcap \Gamma_D = \emptyset$.

O descarte das águas de produção se dá através emissários ditos dispersores, que são dutos por onde o efluente é despejado a uma determinada profundidade. Então podemos considerar que o ingresso no mar das substâncias contaminantes é de maneira local ou pontual. A introdução destas substâncias no meio será representada pela função $f: (0, T] \times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$.

Adicionalmente aos processos de volatilização, oxidação química, biodegradação se somarão os efeitos de diluição no decaimento das concentrações dos constituintes do efluente na massa da água local. Representamos a taxa da ação conjunta destes efeitos através da função $\sigma = \sigma(t, \mathbf{x})$.

Finalmente, vamos supor que, no começo do processo de descarte das substâncias contidas na água de produção, a concentração é dada pela condição inicial $u_0: \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$.

⁷as quais permitem gerar W_1 através da solução numérica das equações de Stokes

De acordo com as considerações feitas anteriormente temos que o problema pode ser modelado pela E.D.P.:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Div(-\alpha \nabla u + Vu) + \sigma u = f, (t, \mathbf{x}) \in (0, T] \times \Omega$$

$$u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$$

$$-\alpha(u) \frac{\partial u}{\partial \eta} = k_N u, (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Gamma_N.$$
(1.4)

Observe-se que a possibilidade da descontinuidade das funções correspondentes à fonte, aos parâmetros ou à condição inicial faz com que a equação (1.4) possa não admitir solução no sentido clássico. Em geral as equações derivadas a partir das leis de conservação não têm solução no sentido clássico (ver [9]), porém definem problemas bem postos considerando a definição de soluções generalizadas ou fracas.

As exigências de suavidade e diferenciabilidade sobre a função u impostas por esta equação podem ser enfraquecidas através da introdução da derivada no sentido das distribuições, o que permite obter a formulação Variacional ou Fraca associada a (1.4), formulação que apresenta diversas vantagens em relação a esta última e que será introduzida no capítulo a seguir onde será, também, objeto de estudo e análise.

Capítulo 2 Formulação variacional

Com o intuito de efetuarmos um tratamento matemático mais adequado às condições em que é apresentado o problema estabelecido no capítulo anterior, faremos algumas considerações matemáticas. Para tal propósito, na segunda seção deste capítulo, introduzimos a formulação variacional de (1.4), que, sob determinadas hipóteses, admite uma única solução conforme o teorema enunciado na seção 2.3.

2.1 Hipóteses de trabalho para o modelo adotado

Com o objetivo de tornar (1.4) numericamente mais tratável, adotamos as hipóteses abaixo afim de simplificá-lo, sem perder, porém, sua capacidade qualitativa :

H1: Neste trabalho vamos assumir que, em meios aquáticos, o coeficiente de difusão α não varia com a posição, com o tempo nem com a própria concentração. Esta última hipótese não é necessária para os resultados analíticos mais gerais, mas, algoritmicamente, permite lidar com aproximações que se constituem em sistemas lineares. O contrário iria requerer, sobretudo, um tratamento numérico mais elaborado e maior custo computacional. Apesar da restrição imposta ao α , é possível manifestar sua variação de acordo com a natureza da substância que está sendo analisada e/ou com a temperatura da água de produção, tal como é feito nas diferentes simulações numéricas para os diversos cenários considerados no capítulo 5.

H2: Assumimos também que o campo de velocidades W_1 tem um comportamento estacionário, i.e. não varia com o tempo e sim apenas com a posição espacial x. Embora o objetivo seja descrever o mapa circulatório local, não há, na modelagem matemática, razão para não assumirmos que suas componentes sejam de algum modo limitadas.

A solução clássica de (1.4) depende fortemente do comportamento da fonte f e da concentração inicial u_0 . Desenvolveremos uma formulação fraca ou variacional pois, com isto, teremos uma abrangência num conjunto maior de soluções para (1.4).

H3: Sendo que o processo de descarga de água de produção acontece de maneira pontual e contínua, vamos adotar a fonte pontual f constante tanto no tempo como no espaço.

H4: No caso da função de degradação σ , é assumida constante no tempo e variável apenas com a profundidade z. Os correspondentes valores de ambas funções serão especificados no capítulo correspondente às simulações numéricas.

2.2 A formulação variacional ou fraca

Existem situações em que a complexidade da geometria do domínio do problema ou as condições de fronteira são tais que impossibilitam a explicitação de uma solução analítica ainda que se possa garantir-lhe a existência. Nestes casos, métodos como o de Galerkin, via elementos finitos, junto com um método adequado para o tempo, são uma ferramenta muito útil, e essencial. A base teórica dos métodos de elementos finitos é a formulação fraca ou variacional. Introduzindo uma discretização do domínio do problema, aproximamos a solução contínua com uma apropriada função contínua por partes e, com isto, o problema de resolvermos uma E.D.P pode-se reduzir a resolver sucessivos sistemas lineares de equações tal como veremos no capítulo 3.

Antes de expressar (1.4) na sua formulação variacional precisamos introduzir algumas notações que permitirão simplificar as expressões envolvidas neste processo.

De um modo geral, seja um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}$. Denotamos:

1. Em $L^2(\Omega)$, o produto interno e correspondente norma dados, respectivamente, por:

$$(u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} = \int_{\Omega} u(\mathbf{x})v(\mathbf{x})d\mu, \quad e \quad || \ u \mid|_{L^{2}(\Omega)} = \sqrt{(u \mid u)_{L^{2}(\Omega)}};$$

denotamos também o produto interno sobre parte da fronteira de Ω :

$$\langle u \mid v \rangle_{L^2(\Gamma_A)} = \int_{\Gamma_A} u(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma$$

2. Em $H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ o espaço das funções quadrado-integráveis com derivadas de primeira ordem no sentido das distribuições quadrado integráveis:

$$H^1(\Omega) = \{ u \in L^2(\Omega) / \frac{\partial u}{\partial x_k} \in L^2(\Omega), k = 1, 2...n \},\$$

o produto interno e correspondente norma dados por:

$$(u \mid v)_{H^{1}(\Omega)} = (u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + (\nabla u \parallel \nabla v)_{L^{2}(\Omega)}$$

$$|| u ||_{H^1(\Omega)}^2 = || u ||_{L^2(\Omega)}^2 + || \nabla u ||_{L^2(\Omega)}^2$$

onde

$$(\nabla u \parallel \nabla v)_{L^2(\Omega)} = \sum_{k=1}^n \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial v}{\partial x_k} d\mu.$$

É de nosso particular interesse trabalhar com funções que pertencem ao subespaço $V \subset H^1(\Omega)$ tal que:

$$V = \{ v \in H^1(\Omega); v |_{\Gamma_D} = 0 \},\$$

com o produto interno e a norma induzida, V é um subespaço de Hilbert, separável e tal que :

$$H_0^1(\Omega) \subset V \subset H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega).$$

Sendo $L^2(\Omega)$ reflexivo, podemos identificá-lo com o seu dual, e, das relações de inclusão descritas acima, temos:

$$V \subset L^2(\Omega) \subset V',$$

inclusões que são contínuas e densas.

A solução u de nosso problema pode ser considerada como uma família de funções de $t \in (0,T] \subset \mathbb{R}$ e de $\mathbf{x} \in \Omega \subset R^3$ tal que :

$$u: [0,T] \longrightarrow V,$$

ou seja, para $t \in (0, T]$,

$$u(t) = u(t, .) : \Omega \longrightarrow R,$$

lembrando que $u_0(\mathbf{x}) = u_0(0, \mathbf{x}) \in V \subset L^2(\Omega)$.

Análoga consideração fazemos para f.

Definimos a derivada $u^{'}:[0,T]\longrightarrow V^{'}$ onde $V^{'}$ é o dual de V por :

$$(u'(t)|v)_{L^2(\Omega)} = \left(\frac{\partial u(t)}{\partial t}|v\right)_{L^2(\Omega)}$$

Sendo $\frac{\partial u(t)}{\partial t}$ considerada no sentido das distribuições ([9] e [14]).

Havendo definido nossos espaços funcionais de trabalho, procedemos à formulação variacional relativa a (1.4).

Após multiplicar cada termo da equação diferencial parcial de (1.4) por $v \in V$ e integrar em relação à variável $\mathbf{x} \in \Omega$ (mantendo t fixo), obtemos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu - \int_{\Omega} \alpha \Delta u v d\mu + \int_{\Omega} Div(Vu) v d\mu + \sigma \int_{\Omega} u v d\mu = \int_{\Omega} f v d\mu, \quad \forall v \in V.$$

Com a notação acima, o problema variacional associado a $(1.4), \forall t \in (0, T]$ é:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v\right)_{L^2(\Omega)} - \alpha(\bigtriangleup u \mid v)_{L^2(\Omega)} + (Div(Vu) \mid v)_{L^2(\Omega)} + \sigma(u \mid v)_{L^2(\Omega)} = (f \mid v)_{L^2(\Omega)}, \forall v \in V.$$
(2.1)

Após aplicar o teorema de Green no segundo termo da esquerda, e utilizando as condições de fronteira (1.2), obtemos:

$$-\alpha(\bigtriangleup u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} = \alpha(\nabla u \parallel \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} - \alpha \langle \frac{\partial u}{\partial \eta} \mid v \rangle_{L^{2}(\partial \Omega)} = \alpha(\nabla u \parallel \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} + \langle k_{N}u \mid v \rangle_{L^{2}(\Gamma_{N})}.$$

Expandindo a terceira parcela à esquerda da expressão (2.1) e substituindo aí a relação acima, temos:

$$(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + \alpha (\nabla u \mid \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} + (uDiv(V) \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + (V \circ \nabla u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + \sigma(u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + k_{N} \langle u \mid v \rangle_{L^{2}(\Gamma_{N})} = (f \mid v)_{L^{2}(\Omega)}, \forall v \in V, \forall t \in (0, T].$$

$$(2.2)$$

Para uso posterior, definimos o operador bilinear a(t; ., .):

$$a(t; u, v) = \alpha(\nabla u \parallel \nabla v)_{L^2(\Omega)} + (V \circ \nabla u \mid v)_{L^2(\Omega)} + \sigma(u \mid v)_{L^2(\Omega)} + k_N \langle u \mid v \rangle_{L^2(\Gamma_N)},$$

uma vez que, $Div(V) \equiv 0$. Desta forma, podemos reescrever (2.2) como:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v\right)_{L^2(\Omega)} + a(t; u, v) = (f \mid v)_{L^2(\Omega)}, \forall v \in V, \forall t \in (0, T].$$

$$(2.3)$$

2.3 Existência e unicidade da solução fraca

A fim de construir métodos para aproximar a solução de (2.3), assumindo-lhes a convergência, precisamos garantir existência e unicidade da solução procurada. Para tal propósito, usaremos o seguinte resultado devido a Lions [14], o qual garante a existência e unicidade de solução para uma classe de problemas abstratos, reescrito aqui de modo adequado aos objetivos deste trabalho.

Teorema 1. Dados o conjunto aberto limitado de fronteira Lipschitz contínua, simplesmente conexo, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e os espaços de Hilbert H e V tais que: $V \subset H$, sendo esta inclusão contínua, e com V denso em H, tal que:

dado T > 0 (fixo), seja a uma família em $t \in [0,T]$ de formas sesquilineares definidas em $V \times V$:

$$a(t; u, v): V \times V \to R$$

satisfazendo as seguintes hipóteses:

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

(ii) $|a(t; u, v)| \leq M \parallel u \parallel_V \parallel v \parallel_V$, q.t.p. em $\Omega, t \in [0, T]$, $\forall u, v \in V$, sendo M uma constante,

(iii) existe $\lambda \in R$ tal que $a(t; v, v) + \lambda \parallel v \parallel_{H}^{2} \geq \beta \parallel v \parallel_{V}^{2}$, q.t.p. em $\Omega, t \in [0, T], \forall v \in V$, sendo β uma constante estritamente positiva,

(iv) dadas $u_0 \in H$ e $f \in L^2(0,T;H)$, então existe uma única função $u \in L^2(0,T;V)$ tal que

$$(\frac{du}{dt} \mid v)_{L^{2}(\Omega)} + a(t; u(t), v) = (f(t) \mid v)_{L^{2}(\Omega)}, \quad q.t.p., em \quad \Omega, \quad t \in [0, T], \quad \forall v \in V$$

$$(u(0) \mid v)_{L^{2}(\Omega)} = (u_{0} \mid v)_{L^{2}(\Omega)} \quad \forall v \in V.$$

$$(2.4)$$

A demonstração deste teorema encontra-se em Lions [14] e de um modo geral para o caso em que a é não linear Meyer[17] faz a demonstração para um problema similar. Portanto, para estabelecer a existência e a unicidade da solução de (1.4), precisamos mostrar que a família de formas sesquilineares a relativa à equação (2.3), satisfaz as hipóteses requeridas. A verificação destas hipóteses implicará na determinação de cotas que limitem as diferentes parcelas que conformam a. É o que fazemos a seguir.

De fato, para $\forall t \in (0, T], u(t) \in v \in V$, temos:

$$\begin{aligned} |\alpha(\nabla u \mid \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} + \sigma(u \mid v)_{L^{2}(\Omega)}| &\leq \sup_{\Omega} \{\alpha, \sigma\} |(\nabla u \mid \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} + (u \mid v)_{L^{2}(\Omega)}| \\ &= \sup_{\Omega} \{\alpha, \sigma\} |(u \mid v)_{H^{1}(\Omega)}| \leq M_{1} \parallel u \parallel_{H^{1}} \parallel v \parallel_{H^{1}}, \quad (2.5) \end{aligned}$$

sendo que esta última desigualdade decorre naturalmente da desigualdade de Cauchy-Schwarz, com $M_1 = \sup_{\Omega} \{\alpha, \sigma\}$.

Antes de achar as cotas que limitam $(V \circ \nabla u \mid v)_{L^2(\Omega)}$, vamos precisar da seguinte desigualdade básica¹:

$$ab \le \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon} \quad \forall \quad a, b \in R, \quad \forall \epsilon > 0,$$
 (2.6)

Sendo que, por hipótese, as componentes da velocidade: V_i , i = 1, 2 e 3 são limitadas em Ω , então, podemos escrever que

$$|(V \circ \nabla u \mid v)_{L^{2}(\Omega)}| = |\sum_{i=1}^{3} \int_{\Omega} V_{i} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} v d\Omega| \leq \sum_{i=1}^{3} \sup_{\Omega} \{|V_{i}|\} \int_{\Omega} |\frac{\partial u}{\partial x_{i}}| |v| d\Omega$$

¹A qual pode ser obtida apartir do fato que, $(\sqrt{\epsilon}a - \frac{b}{2\sqrt{\epsilon}})^2 \ge 0.$
$$\leq M_2 \sum_{i=1}^{3} \int_{\Omega} |\frac{\partial u}{\partial x_i}| |v| d\Omega, \qquad (2.7)$$

onde: $M_2 = \max_i \{ \sup_{\Omega} \{ |V_i| \} \}$. Usando a desigualdade (2.6), temos:

$$\sum_{i=1}^{3} \int_{\Omega} |\frac{\partial u}{\partial x_{i}}| |v| d\Omega \leq \epsilon \sum_{i=1}^{3} \int_{\Omega} |\frac{\partial u}{\partial x_{i}}|^{2} d\Omega + \frac{3}{4\epsilon} \int_{\Omega} |v|^{2} d\Omega = \epsilon ||\nabla u||^{2}_{L^{2}(\Omega)} + \frac{3}{4\epsilon} ||v||^{2}_{L^{2}(\Omega)},$$

substituindo esta última desigualdade em (2.7) após considerar $\epsilon = \frac{\alpha_{inf}}{2M_2}$, obtemos:

$$(V \circ \nabla u \mid v)_{L^{2}(\Omega)} \leq \frac{\alpha_{inf}}{2} \|\nabla u\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{3M_{2}}{2\alpha_{inf}} \|v\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$
(2.8)

por outro lado, da desigualdade de Cauchy-Schwarz decorre que,

 $|(V \circ \nabla u \mid v)_{L^{2}(\Omega)}| \leq ||V \circ \nabla u||_{L^{2}(\Omega)} ||v||_{L^{2}(\Omega)} \leq M_{2} ||\nabla u||_{L^{2}(\Omega)} ||v||_{L^{2}(\Omega)} \leq M_{2} ||\nabla u||_{H^{1}(\Omega)} ||v||_{H^{1}(\Omega)}$ (2.9)

e, também,

$$\begin{aligned} |k_N \langle u \mid v \rangle_{L^2(\Gamma_N)}| &\leq k_N ||u||_{L^2(\Gamma_N)} ||v||_{L^2(\Gamma_N)} \leq k_N ||u||_{L^2(\partial\Omega)} ||v||_{L^2(\partial\Omega)} \leq M_3 ||u||_{H^1(\Omega)} ||v||_{H^1(\Omega)} \\ (2.10) \end{aligned}$$
assumindo que $\partial\Omega \in C^1$ esta última desigualdade decorre do teorema do traço (ver [9]).

Agora, vamos descrever o processo formal da demonstração, mostrando que o presente problema (2.3) verifica todas as hipóteses exigidas pelo teorema de Lions. De fato,

1. A mensurabilidade de a segue da sua definição.

2. As desigualdades (2.5), (2.9) e (2.10) permitem estabelecer que

$$\begin{aligned} |a(t; u(t), v)| &= |\alpha(\nabla u || \nabla v)_{L^{2}(\Omega)} + (V \circ \nabla u |v)_{L^{2}(\Omega)} + \sigma(u |v)_{L^{2}(\Omega)} + k_{N} \langle u |v \rangle_{L^{2}(\Gamma_{N})}| \\ &\leq (M_{1} + M_{2} + M_{3}) ||u||_{H^{1}(\Omega)} ||v||_{H^{1}(\Omega)} = M ||u||_{H^{1}(\Omega)} ||v||_{H^{1}(\Omega)} \end{aligned}$$

e, desta forma, fica garantida a continuidade do operador a.

3. Para cada $t \in (0, T]$, pretendemos achar constantes $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\beta > 0$ tais que:

$$a(t; v, v) + \lambda \parallel v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} \ge \beta \parallel v \parallel_{H^{1}(\Omega)}^{2}, \forall v \in V.$$

De fato, da definição de a(t, u, v) e tomando u = v nas desigualdades (2.8) e (2.10), decorre que:

$$\begin{aligned} a(t;v,v) &\geq & \alpha_{inf} \parallel \nabla v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \frac{\alpha_{inf}}{2} \parallel \nabla v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \frac{3M_{2}}{2\alpha_{inf}} \parallel v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \sigma \parallel v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} - M_{3} \parallel v \parallel_{H^{1}(\Omega)}^{2} \\ &= & \frac{\alpha_{inf}}{2} (\parallel \nabla v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \parallel v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2}) - (\frac{3M_{2}}{2\alpha_{inf}} + \sigma + \frac{\alpha_{inf}}{2} + M_{3}) \parallel v \parallel_{L^{2}(\Omega)}^{2} . \end{aligned}$$

Desta forma, temos que

$$a(t; v, v) + \lambda || v ||_{L^{2}(\Omega)}^{2} \ge \beta || v ||_{H^{1}(\Omega)}^{2}, \forall v \in V,$$
(2.11)

onde $\lambda=(\frac{3M_2}{2\alpha_{inf}}+\sigma+\frac{\alpha_{inf}}{2}+M_3)$ e $\beta=\frac{\alpha_{inf}}{2},$ fechando esta prova.

Capítulo 3 Discretização do problema

Uma vez que o teorema(1) nos garante existência e unicidade da solução do problema variacional (2.3) em subespaços V, podemos utilizar algum método numérico apropriado para aproximar adequadamente a sua solução. O Método de Galerkin é um método numérico que permite construir uma solução aproximada do problema variacional associado a (1.4). Para tal propósito pode-se fazer uma discretização espacial finita do domínio do problema em questão, sobre a qual é construída uma base de funções de um subespaço finito de V. São estas funções base as que permitirão construir a solução do problema variacional, e com isto, uma solução aproximada u_h do nosso problema. Todo este processo é detalhado nas próximas seções deste capítulo.

3.1 Discretização espaço-temporal

Para propósitos de simplificação, nas expressões a seguir, a não ser que indiquemos diferentemente, os produtos internos $(.|.)_{\Omega} \in \langle . | . \rangle_{\Gamma}$ representam $(.|.)_{L^2(\Omega)} \in \langle . | . \rangle_{L^2(\Gamma)}$ respectivamente.

Seja V_h um subespaço de V de dimensão finita gerado pela base $\mathbf{B} = \{\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{n_h}\}$. Assim a solução do problema (2.3) no subespaço V_h , pode ser representada como:

$$u_h(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}),$$

pois, substituindo u_h na formulação variacional (2.3), para $\forall v \in V_h$, temos¹:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t} \mid v\right)_{\Omega} + \alpha (\nabla u_h \parallel \nabla v)_{\Omega} + (V \circ \nabla u_h \mid v)_{\Omega} + \sigma (u_h \mid v)_{\Omega} + k_N \langle u_h \mid v \rangle_{\Gamma_N} = (f \mid v)_{\Omega}, \quad (3.1)$$

¹Embora (3.1) indique produtos internos em $\Omega \in \Gamma_N$ a rigor deveriam ser definidos nas aproximações $\Omega_h \in \Gamma_{N_h}$ respectivamente, com $\Omega_h \to \Omega \in \Gamma_{N_h} \to \Gamma_N$ de algum modo quando h, o "tamanho" dos elementos espaciais da discretização, se aproximar de zero.

ou, equivalentemente,

$$\begin{split} (\sum_{i}^{n_{h}} \frac{dc_{i}}{dt}\varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \alpha (\sum_{i}^{n_{h}} c_{i}\nabla\varphi_{i} \mid | \nabla v)_{\Omega} + (\sum_{i}^{n_{h}} c_{i}V \circ \nabla\varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \sigma (\sum_{i}^{n_{h}} c_{i}\varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \\ &+ k_{N} \langle \sum_{i}^{n_{h}} c_{i}\varphi_{i} \mid v \rangle_{\Gamma_{N}} = (f \mid v)_{\Omega}, \quad \forall v \in V_{h}, \end{split}$$

Este procedimento corresponde, de fato, ao conceito de separação de variáveis e, uma vez que as funções c_i não dependem de $\mathbf{x} \in \Omega$:

$$\begin{split} \sum_{i}^{n_{h}} \frac{dc_{i}}{dt}(\varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \alpha \sum_{i}^{n_{h}} c_{i}(\nabla \varphi_{i} \mid \mid \nabla v)_{\Omega} &+ \sum_{i}^{n_{h}} c_{i}(V \circ \nabla \varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \sigma \sum_{i}^{n_{h}} c_{i}(\varphi_{i} \mid v)_{\Omega} + \\ &+ k_{N} \sum_{i}^{n_{h}} c_{i}\langle \varphi_{i} \mid v \rangle_{\Gamma_{N}} = (f \mid v)_{\Omega}, \quad \forall v \in V_{h}. \end{split}$$

No método de Galerkin a formulação peso-residual é tal que as funções peso ou teste v são da mesma classe das funções base φ_i . Desta forma,

$$\begin{split} \sum_{i}^{n_{h}} \frac{dc_{i}}{dt} (\varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} + \alpha \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (\nabla \varphi_{i} \mid \mid \nabla \varphi_{j})_{\Omega} &+ \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (V \circ \nabla \varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} + \sigma \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (\varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} + \\ &+ k_{N} \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} \langle \varphi_{i} \mid \varphi_{j} \rangle_{\Gamma_{N}} = (f \mid \varphi_{j})_{\Omega}, \quad \forall \varphi_{j} \in \mathbf{B}, \end{split}$$

fazendo $c = (c_1(t), c_2(t), c_3(t), ..., c_{n_h}(t))^T$, este sistema é equivalente ao sistema linear de E.D.O.:

$$A(\varphi_i, \varphi_j)\dot{c}(t) + B(\varphi_i, \varphi_j)c(t) = d(f, \varphi_j), \qquad (3.2)$$

onde as matrizes $A = (a_{ij}), B = (b_{ij})$ e o vetor $d = (d_j)$ são dados por :

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (\varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega}, \\ b_{ij} &= \alpha (\nabla \varphi_i \mid \nabla \varphi_j)_{\Omega} + (V \nabla \circ \varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega} + \sigma (\varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega} + k_N \langle \varphi_i \mid \varphi_j \rangle_{\Gamma_N}, \\ d_j &= (f \mid \varphi_j)_{\Omega}. \end{aligned}$$
(3.3)

para $i, j = 1, 2,n_h$.

O passo seguinte é fazer a discretização temporal. Para tal efeito utilizamos o Método de Diferenças Finitas de tipo Crank-Nicolson, centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, segundo o qual obtemos as seguintes aproximações, usando a notação $c_j^n \cong c(t_n, \mathbf{x}_j)$:

$$\frac{dc_j}{dt}\Big|_{tn+\frac{\Delta t}{2}} = \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} \quad e \quad c_j(tn+\frac{\Delta t}{2}) \approx \frac{c_j^{n+1} + c_j^n}{2}.$$

Após manipulações algébricas adequadas na expressão (3.2), obtemos o sistema linear de equações :

$$(\frac{A+B}{2})c^{n+1} = (\frac{A-B}{2})c^n + d^{n+\frac{1}{2}}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

ou de forma genérica:

$$\hat{A}c^{n+1} = \hat{B}c^n + d^{n+\frac{1}{2}}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

aproximação temporal que é da ordem $\vartheta(\Delta t^2)$.

A resolução numérica deste sistema depende, entre outras coisas, da construção de uma malha sobre o domínio Ω (definindo os elementos finitos) e uma adequada escolha das funções base do subespaço V_h , tal como é descrito na seguinte subseção.

3.1.1 As funções base e a discretização do domínio

Dos diferentes tipos de elementos finitos que podem ser escolhidos para discretizar um determinado domínio bidimensional, em geral os triângulos são os mais adequados para descrever domínios cuja geometria é mais irregular. Assim, para domínios tridimensionais, os tetraedros são uma extensão natural e conveniente dos elementos triangulares.

Denotemos com $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ uma família finita de NT tetraedros Ω_e , dois a dois disjuntos ou tendo como interseção no máximo uma face, ou uma aresta e tais que :

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{NT} \Omega_e,$$

associamos a esta malha o parâmetro h dado por

 $h = max_e \{ diam(\Omega_e) \}$ e,

desta forma, denotamos a família $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ por $\Upsilon_h.$

A figura abaixo ilustra a necessidade de estabelecermos uma relação entre um elemento finito qualquer Ω_e , e seu correspondente elemento $\hat{\Omega}_e$, no sistema referencial de coordenadas. De fato, esta relação é dada pela transformação afim,

$$\mathbf{T}(\xi,\eta,\zeta) = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_4 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_4 - y_1 \\ z_2 - z_1 & z_3 - z_1 & z_4 - z_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$
(3.4)

Dentre os diferentes subespacos finitos que podem ser escolhidos para definir V_h , consideramos o espaço das funções polinomiais de três variáveis de grau menor ou igual a $n \in \{1, 2\}$ definidos em Ω_e , i.e.



Figura 3.1: Transformação afim $T: \hat{\Omega}_e \longrightarrow \Omega_e$

$$\mathsf{P}_n(\Omega_e) = \{ p : \Omega_e \to R/p(\mathbf{x}) = \sum_{|\alpha| \le n} a_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} x^{\alpha_1} y^{\alpha_2} z^{\alpha_3}, a_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \in R \},$$

onde $\mathbf{x} = (x, y, z)$. Este espaço tem dimensão finita, e cada função base assume um único valor em cada ponto ou nó da malha. Se NTN denota o número total de nós, então teremos a mesma quantidade de funções polinomiais na base. Pelas características do problema bem como pelo contexto do espaço funcional resulta de particular interesse o subespaço:

$$V_{ho} = \{ \varphi \in C^0(\overline{\Omega}) / \varphi |_{\Omega_e} \in \mathsf{P}_n(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \Upsilon_h, \varphi |_{\Gamma_D} = 0 \}.$$

Com o intuito de facilitar os cálculos envolvidos na construção das matrizes $A, B \in d$ definidas por (3.3) adotam-se, como base do espaço V_{ho} , as funções φ_i tais que:

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

sendo δ_{ij} a função delta de Kronecker e b_j o j-ésimo nó do elemento Ω_e . No caso de elementos de primeira ordem, para cada nó $j(1, \ldots, NTN)$, se obtem uma função φ_j que é linear por partes. Assim o aspecto geométrico (em $\Omega \subset R^2$) de cada função φ_i é uma pirâmide virtual sobre cada elemento Ω_e , assumindo o valor 1 no j-ésimo nó e zero nos demais nós da malha.

Logo, qualquer elemento $v_h \in V_{ho}$ pode ser respresentado como:

$$v_h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{NTN} v_h(b_j)\varphi_j(\mathbf{x}).$$

Para o caso em que n = 1 temos que as funções polinomiais $\varphi_i \in V_{ho}$ que correspondem aos elementos de primeira ordem i.e. considerando apenas os vértices $(0, A, B \in C)$ do tetraedro no sistema referencial de coordenadas, temos :

$$arphi_1(x, y, z) = 1 - x - y - z, \quad arphi_2(x, y, z) = x \ arphi_3(x, y, z) = y, \quad e \quad arphi_4(x, y, z) = z,$$

é fácil verificar que estas assumem o valor 1 nos vértices $O, A, B \in C$ respectivamente, e são nulas nos vértices restantes.

Quando n = 2, e no caso de elementos de segunda ordem, as nossas funções polinomiais φ_i ficarão unicamente determinadas pelo valor que assumem nos vértices e nos pontos médios de cada aresta do tetraedro $\hat{\Omega}_e$. Assim, temos:

$$\begin{split} \varphi_1(x,y,z) &= 1 - 3x - 3y - 3z + 2(x^2 + y^2 + z^2) + 4(xy + xz + yz), \quad \varphi_2(x,y,z) = 4x(1 - x - y - z) \\ \varphi_3(x,y,z) &= x(-1+2x), \quad \varphi_4(x,y,z) = 4xy, \quad \varphi_5(x,y,z) = y(-1+2y), \\ \varphi_6(x,y,z) &= 4y(1 - x - y - z), \quad \varphi_7(x,y,z) = 4z(1 - x - y - z), \\ \varphi_8(x,y,z) &= 4xz, \quad \varphi_9(x,y,z) = 4yz, \text{ e} \quad \varphi_{10}(x,y,z) = z(-1+2z). \end{split}$$

Estas dez funções bem como as diversas integrais que correspondem aos elementos das matrizes $A \in B$ e o vetor d dados na expressão (3.3) foram determinadas com ajuda de um pequeno programa implementado em MatLab, ver anexos.

3.2 SUPG

Existe a possibilidade de que as soluções numéricas obtidas através do Método de Galerkin sejam corrompidas por oscilações, isto acontecerá em casos de problemas com convecção ou advecção dominantes. Estas oscilações indesejáveis podem ser evitadas fazendo um adequado refinamento da malha, mas o preço a pagar é um alto custo computacional. Uma alternativa ao método de Galerkin puro que não precisa disto é o método Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) introduzido por Brooks e Hughes [1], no qual a idéia básica é modificar as funções peso residual para o termo convectivo do Método de Galerkin, pertubação que só atua na direção do fluxo, evitando a excessiva difusibilidade presente nas soluções obtidas através dos outros métodos, sem introduzir difusão artificial e perder consistência como alguns métodos Upwind. Assim, as funções modificadas são da forma:

$$\tilde{\varphi}_i = \varphi_i + \psi_i,$$

onde φ_i são as funções que geram V_{h0} , e ψ_i são funções descontinuas que só atuam na direção do campo de velocidades, as quais dependem tanto do campo V como do número

de Péclet.

Inserindo as novas funções na expressão (2.3) para obter a formulação SUPG, vem:

$$\sum_{e} \int_{\Omega_{e}} \left(\frac{\partial u_{h}}{\partial t} - Div(-\alpha \nabla u_{h} + Vu_{h}) + \sigma u_{h} - f \right) \psi_{j} d\Omega + \left(\frac{\partial u_{h}}{\partial t} \mid \varphi_{j} \right)_{\Omega} + a(u_{h}; u_{h}, \varphi_{j}) = (f \mid \varphi_{j}).$$

Como em Codina [4], neste trabalho consideramos:

$$\psi_i = \tau V \circ \nabla \varphi_i,$$

onde τ é um parâmetro, escolhido de tal forma a se obter uma solução nodalmente exata ou muito próxima desta. Para problemas de dimensão espacial maior que 1 uma estratégia amplamente adotada é proceder como no caso unidimensional, no qual se atinge uma solução nodalmente exata para elementos finitos lineares, quando:

$$\tau = (\coth(Pe) - \frac{1}{Pe})\frac{1}{2|V|},$$

onde $Pe = \frac{|V|h}{2\alpha}$ é o número de Péclet, sendo α o coeficiente de difusão, V é a velocidade unidimensional respectivamente, e h representa o comprimento de um elemento da malha uniforme.

O processo para calcular τ_e é descrito segundo os passos resumidos abaixo, conforme o procedimento que aparece em [3], já incorporado com sucesso em diversos trabalhos correlatos ([2] e [6]).

<u>**Passo</u> 1**: Calcular a norma euclidiana da média aritmética das velocidades características V_e dos nós do tetraedro Ω_e .</u>

<u>**Passo</u></u> 2: A partir dos vetores velocidade no elemento \Omega_e, usar a transformação afim T da seção anterior para determinar os vetores correspondentes no tetraedro \hat{\Omega}_e, do sistema de referência. Aplicar o passo 1 a estas velocidades para obter a velocidade característica V_{ref}.</u>**

<u>Passo</u> 3: Calcular o comprimento característico h_e dado por, $h_e = 0.7 \frac{|V_e|}{|V_{ref}|}$,

<u>Passo</u> 4: Calcular o número de Péclet γ_e , dado por $\gamma_e = \frac{h_e |V_e|}{2\alpha}$,

<u>Passo</u> 5: Calcular a função upwind $\epsilon = \operatorname{coth}(\gamma_e) - \frac{1}{\gamma_e}$,

<u>Passo</u> 6: Calcular o tempo intrínseco : $\tau_e = \frac{\epsilon h_e}{2|V_e|}$.

3.3 Implementação

O objetivo desta seção é ilustrar em linhas gerais o processo da implementação dos programas que foram implementados em $MatLab^{\textcircled{R}}$ versão 6.1, e encontram-se no apêndice deste trabalho.

3.3.1 A Malha

Os elementos finitos (Ω_e) considerados neste trabalho são os de segunda ordem caracterizados por tetraedros cujos nós são os vértices e os pontos médios dos lados.

Como nosso domínio Ω é consideravelmente regular nós decidimos implementar um programa para gerar uma malha, em vez de utilizar algum dos diferentes softwares específicos e disponíveis no meio. A saída deste programa fornece, entre outras informações, a numeração global dos nós e suas respectivas coordenadas, a numeração dos tetraedros e seus vértices e pontos médios no caso de elementos de II ordem. Em cada elemento Ω_e os vértices são percorridos em sentido antihorário.

3.3.2 Campo de velocidades

A Mecânica dos fluídos incompressíveis é governada pelas equações de Stokes. Além disso estas fazem parte das equações de Navier-Stokes, as mesmas que modelam fenômenos físicos mais complicados e evolutivos. As equações de Stokes aparecem em problemas das mais diversas áreas, daí que o interesse da sua solução numérica tenha promovido intensa pesquisa inclusive com os métodos de elementos finitos.

$$\begin{split} \mu \Delta W_1 &- grad(P) + f = 0\\ div W_1 &= 0\\ W_1(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}), \quad \forall \quad \mathbf{x} \in \Gamma_g\\ \frac{\partial W_1}{\partial n}|_{\Gamma_h} &= h \end{split}$$

Aqui, Ω é um conjunto aberto e limitado do \mathbb{R}^3 tal que $\partial \Omega = \Gamma = \Gamma_g \cup \Gamma_h$ e $\emptyset = \overline{\Gamma_g \cap \Gamma_h}$, μ é o coeficiente de viscocidade, W_1 é a velocidade , P é a pressão e f é a força do corpo (no nosso caso f = 0).

Sendo a velocidade e a pressão as variáveis dependentes, então, uma vez aplicado o método de elementos finitos na formulação variacional de Galerkin (clássico), este dá lugar ao denominado "método misto" pois cada função incógnita pertence a um determinado espaço funcional, porém o sucesso deste tipo de formulação depende fortemente do tipo particular de interpolações utilizadas para a pressão e a velocidade. Combinações quaisquer podem produzir grandes oscilações nas soluções. A ferramenta matemática que explica o comportamento dos métodos mistos para o problema de Stokes foi providenciada por Babuška e Brezzi [11], sendo denominada como a condição de Babuška-Brezzi. Apesar de muitas combinações de interpolações de pressão e velocidade serem convergentes, a sua implementação computacional é difícil. No entanto, apesar das implementações de igual ordem² serem as mais atrativas desde o ponto de vista computacional, elas não satisfazem o teste de Babuška-Brezzi. Contornando esta dificuldade, em [11] os autores desenvolvem a formulação de Petrov-Galerkin do problema de Stokes, a qual, além de passar o teste de Babuška-Brezzi para qualquer combinação de interpolações contínuas, é muito mais estável em relação à formulação clássica de Galerkin.

Formulação através de elementos finitos

A combinação de interpolações P_2/P_0 , através do método de Galerkin foi adotada aqui pois, além de mostrar-se computacionalmente estável, sua implementação é relativamente fácil. São utilizadas como funções base funções polinomiais quadráticas e funções constantes para interpolar a variável velocidade e a pressão, respectivamente. Dessa forma, a segunda variável é descontínua.

Como sabemos, no Método de Galerkin as funções base e teste pertencem ao mesmo espaço. Denotemos com :

 $V^h \subset H^1(\Omega)$ o espaço das funções velocidades pe
so (ou teste) e base .

 $\mathbf{P}^h \subset L^2(\Omega)$ o espaço das funções da pressão peso (ou teste) e base ,

onde $H^1(\Omega)$ e $L^2(\Omega)$ são como definidos previamente na seção (2.2). Assim, dada g, queremos achar $v_k^h \in V^h$, k = 1, 2 e 3 e $p^h \in \mathbf{P}^h$ tais que $\forall w^h \in V^h$ e $\forall q^h \in \mathbf{P}^h$,

$$-(\mu\Delta v_k^h, w^h)_{\Omega} + (\frac{\partial p^h}{\partial x_k}, w^h)_{\Omega} = 0 \quad e$$
$$\sum_{k=1}^3 (\frac{\partial v_k^h}{\partial x_k}, q^h)_{\Omega} = 0$$

Consideramos a mesma discretização adotada para o domínio Ω na seção (2.2), denotando com NI, NE e ne o número de nós internos, externos e o número de elementos finitos (tetraedros) respectivamente. Assim, temos que elementos $v_k^h \in V^h \in \mathbf{P}^h$ podem ser escritos como:

$$v_k^h = \sum_{j=1}^{NE} v_{kj} \varphi_j + \sum_{j=1}^{NI} v_{kj} \varphi_j, k = 1, 2, 3,$$

²através do método de Galerkin

$$p^h = \sum_{e=1}^{ne} p_e \chi_{\Omega_e},$$

respectivamente, onde $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{n_h}\}$ é a mesma base adotada na seção (2.2) e χ é a função característica.

Após algumas manipulações algébricas, as expressões acima podem ser reescritas como:

$$\mu \sum_{k=1}^{ne} \sum_{j=1}^{NI} v_{kj} (\nabla \varphi_j | \nabla \varphi_i)_{\Omega_k} - \sum_{k=1}^{ne} p_k (1 | \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k})_{\Omega_k} = -\mu \sum_{k=1}^{ne} \sum_{j=1}^{NE} v_{kj} (\nabla \varphi_j | \nabla \varphi_i)_{\Omega_k}$$
$$\sum_{k=1}^{ne} \sum_{j=1}^{NI} v_{kj} (\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k} | 1)_{\Omega_k} = 0$$

Estas expressões podem ser escritas de maneira compacta através do sistema linear de equações :

$$\mu A \mathbf{u} - B_1 \mathbf{p} = C_1$$

$$\mu A \mathbf{v} - B_2 \mathbf{p} = C_2$$

$$\mu A \mathbf{w} - B_3 \mathbf{p} = C_3$$

$$B_1^t \mathbf{u} + B_2^t \mathbf{v} + B_3^t \mathbf{w} = 0$$

Onde as Matrizes $A = (a_{ij}) \in B_s = (b_{ik}^s)$, são tais que :

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (\nabla \varphi_i | \nabla \varphi_j)_{\Omega_e} \\ b_{ik}^s &= (1 | \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k})_{\Omega_e}, \end{aligned}$$

com i, j = 1, 2, ..., NI, k = 1, 2, 3, ..., ne e s = 1, 2, 3, sendo \mathbf{u}, \mathbf{v} e \mathbf{w} vetores que correspondem às componentes de v^h e \mathbf{p} é o vetor que contém os valores da pressão.

A solução numérica destas equações é feita através de um programa que denominamos de "StokesP2P0" o qual foi implementado também em ambiente $MatLab^{(R)}$ versão 6.1. A saída deste programa é incorporada ao programa principal o qual simula a dispersão da pluma das diferentes substâncias contidas na água de produção. As condições de fronteira utilizadas para alimentar o programa que gera o campo de velocidades e os valores da pressão em cada nó do domínio Ω , são definidas no capítulo 5.

3.3.3 Condições iniciais e a fonte

As diferentes substâncias contidas na água de produção fazem seu ingresso no mar através de dispersores (dutos) localizados a uma determinada profundidade fixa. Então, nas diferentes simulações que realizaremos na próxima seção, consideraremos uma fonte pontual e

constante, a qual permanece ligada durante as primeiras horas e localizada pontualmente na parte central do domínio $\Omega.$

No capítulo a seguir fazemos estimativas do erro induzido pelo método de Galerkin contínuo e discreto no tempo, respectivamente. A abordagem adotada será através da técnica aplicada de maneira pioneira por Douglas e Dupont [8] ([23]) e posteriormente utilizada em [17] e [6].

Capítulo 4

Galerkin contínuo e Crank-Nicolson: Estimativas de erro

A resolução de problemas variacionais como (2.3), feita em subespaços $V_h \in V$ de dimensão finita, permite obter soluções aproximadas do problema original, soluções que teoricamente convergirão (e, também, na prática) para a solução analítica na medida em que os subespaços V_h tornem-se densos em V. Este procedimento pode ser feito através de métodos como o método de Galerkin o qual, via procedimentos com elementos finitos, fornecerá tais aproximações. Para tal, consideramos

$$\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots,\} \in \{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots,\varphi_{n_h}\},\$$

bases do espaço de Hilbert V, e de seu correspondente subespaço V_h respectivamente.

Na seção a seguir, analisamos o erro cometido quando aplicado o Método de Galerkin contínuo no tempo para achar a solução do problema,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v\right)_{\Omega} + a(t; u, v) = (f \mid v)_{\Omega}, \forall v \in V,$$
(4.1)

e

$$(u(0,.),v) = (u_0,v), \forall v \in V,$$
(4.2)

supondo que $\forall t \in (0,T], u(.,t), \frac{\partial u}{\partial t}(.,t), \frac{\partial u}{\partial x}(.,t), \frac{\partial u}{\partial y}(.,t)$ e $\frac{\partial u}{\partial z}(.,t)$ pertencem a $L^2(0,T; L^2(\Omega))$. Assim, se u_h representa uma aproximação numérica da solução de (4.1), obtida através do método de Galerkin via elementos finitos, num subespaço V_h de V, temos

$$\left(\frac{\partial u_h(t)}{\partial t} \mid v_h\right)_{\Omega} + a(t; u_h, v_h) = (f \mid v_h)_{\Omega}, \forall v_h \in V_h,$$
(4.3)

sendo $t \in (0, T]$, fixo, com a condição inicial tal que,

$$(u_h(0,.), v_h) = (u_0, v_h), \forall v_h \in V_h.$$
(4.4)

Então, uma estimativa do erro absoluto será feita através da norma $||u - u_h||_{L^{\infty}(0,T;L^2(\Omega))}$. Para obtê-la, primeiro vamos obter uma estimativa para

$$\frac{d(||u-u_h||_{L^2(\Omega)})}{dt},$$

para $t \in (0, T)$ fixo, e em seguida integramos em relação a t.

Na seção (4.2) é estimado um limitante superior para o erro induzido pelo método de Galerkin discreto no tempo quando utilizado o método de Crank-Nicolson.

4.1 Galerkin contínuo

Substituindo $u_h(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) e v_h = \varphi_j, j = 1, 2, \dots, n_h$ na equação (4.3), temos

$$\begin{split} \sum_{i}^{n_{h}} \frac{dc_{i}}{dt} (\varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} &+ \alpha \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (\nabla \varphi_{i} \mid \mid \nabla \varphi_{j})_{\Omega} + \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (V(t, \mathbf{x}) \circ \nabla \varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} \\ &+ \sigma \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} (\varphi_{i} \mid \varphi_{j})_{\Omega} + k_{N} \sum_{i}^{n_{h}} c_{i} \langle \varphi_{i} \mid \varphi_{j} \rangle_{\Gamma_{N}} = (f \mid \varphi_{j})_{\Omega}, \quad \forall \varphi_{j}, \end{split}$$

um sistema de equações que, de maneira compacta, pode ser representado através do sistema não linear de E.D.O.:

$$A(\varphi_i, \varphi_j)\dot{C}(t) + B(\varphi_i, \varphi_j, t)C(t) = d(f, \varphi_j).$$
(4.5)

As matrizes $A = (a_{ij}), B = (b_{ij})$ e o vetor $d = d_j$ são dados por :

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (\varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega}, \\ b_{ij}(t) &= \alpha (\nabla \varphi_i \mid \nabla \varphi_j)_{\Omega} + (V(t, \mathbf{x}) \nabla \circ \varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega} + \sigma (\varphi_i \mid \varphi_j)_{\Omega} + k_N \langle \varphi_i \mid \varphi_j \rangle_{\Gamma_N}, \\ d_j &= (f \mid \varphi_j)_{\Omega}, \\ C(t) &= (c_1(t), c_1(t), \dots, c_{n_h}(t))^T. \end{aligned}$$

para $i, j = 1, 2,, n_h$.

Considerando

$$u_{h_0}(\mathbf{x}) = u_h(0, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(0)\varphi_i(\mathbf{x}) \quad \mathbf{e} \quad v_h = \varphi_j,$$

a partir da relação (4.4), obtemos o sistema AC(0) = b onde $b_j = (u_0 | \varphi_j)$. A solução deste sistema permite obter a condição inicial do sistema de equações diferenciais ordinárias (4.5), e, conseqüentemente, uma aproximação da condição inicial em V_h do problema (4.3). Fazendo (4.3)-(4.1) e considerando $v=v_h=\phi-u_h$ com $\phi\in L^2(0,T;V_h)$ para $t\in(0,T]$ fixo¹, temos

$$\left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid \phi - u_h\right)_{\Omega} + \left[a(u,\phi - u_h) - a(u_h,\phi - u_h)\right] = 0.$$
(4.6)

As seguintes equivalências serão necessárias:

(i)
$$\left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid \phi - u_h\right) = \left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid u - u_h\right) - \left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid u - \phi\right),$$

(ii) $a(u-u_h, u-u_h) - \left[a(u, \phi - u_h) - a(u_h, \phi - u_h)\right] = a(u, u - \phi) - a(u_h, u - \phi)$
 $= a(u-u_h, u - \phi),$

ambas validas $\forall \phi \in L^2(0,T;V_h)$.

Somando $a(u - u_h, u - u_h)$ a ambos os membros de (4.6) e utilizando as equivalências acima e, ainda, após algumas manipulações álgebricas obtemos,

$$\left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid u-u_h\right)_{\Omega} + a(u-u_h, u-u_h) = \left(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid u-\phi\right)_{\Omega} + a(u-u_h, u-\phi).$$

$$(4.7)$$

Agora, procedemos à estimativa da segunda parcela do lado direito desta expressão.

As desigualdades estabelecidas na seção (2.3) permitem afirmar que

$$\begin{aligned} |a(u - u_h \quad , \quad u - \phi)| &\leq \alpha_{sup} \|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla(u - \phi)\|_{L^2(\Omega)} + |\sigma|\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)} \|u - \phi\|_{L^2(\Omega)} \\ &+ \quad M_3 \|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \|u - \phi\|_{H^1(\Omega)} + M_2(t) \|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)} \|u - \phi\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

onde $M_2(t) = max_i \{ \sup_{\Omega} \{ |V_i(.,t)| \} \}$, e M_3 é como já definido em (2.10). Se fizermos²

$$M_2 = \sup_{t \in (0,T)} ess\{M_2(t)\},\tag{4.8}$$

e aplicarmos a desigualdade básica (2.6) da seção (2.3) em cada uma das parcelas do lado direito da última desigualdade, temos que

$$\begin{aligned} |a(u-u_h, u-\phi)| &\leq \epsilon_1 \|\nabla(u-u_h)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1} \|\nabla(u-\phi)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \epsilon_2 \|u-u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} \|u-\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \epsilon_3 \|\nabla(u-u_h)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3} \|u-\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \epsilon_4 \|u-u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_3^2}{4\epsilon_4} \|u-\phi\|_{H^1(\Omega)}^2, \end{aligned}$$

¹isto permite omitirmos t nas expressões a seguir para efeitos de simplificação.

 $^{^2 \}mathrm{Nesta}$ análise estamos considerando a possibilidade do campo de velocidades Vvariar também no tempo

ou equivalentemente,

$$\begin{aligned} |a(u-u_h,u-\phi)| &\leq (\epsilon_1+\epsilon_3) \|\nabla(u-u_h)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1} \|\nabla(u-\phi)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \epsilon_2 \|u-u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ (\frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3}) \|u-\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \epsilon_4 \|u-u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_3^2}{4\epsilon_4} \|u-\phi\|_{H^1(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Quanto à segunda parcela do lado esquerdo de (4.7), a partir da desigualdade (2.11), decorre que:

$$a(u - u_h, u - u_h) \ge \beta || u - u_h ||_{H^1(\Omega)}^2 - \tilde{\lambda} || u - u_h ||_{L^2(\Omega)}^2,$$

substituindo as duas últimas desigualdades acima em (4.7), obtemos

$$\begin{split} \frac{1}{2} \frac{d\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2}{dt} &+ \beta \| u - u_h \|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \tilde{\lambda} \| u - u_h \|_{L^2(\Omega)}^2 + (\epsilon_1 + \epsilon_3) \|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1} \|\nabla(u - \phi)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \epsilon_2 \|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + (\frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3}) \|u - \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \epsilon_4 \|u - u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_3^2}{4\epsilon_4} \|u - \phi\|_{H^1(\Omega)}^2 + (\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t} \| u - \phi)_{\Omega}. \end{split}$$

Multiplicando por 2 esta desigualdade e fazendo

$$\begin{aligned} c_1 &= 2(\beta - \epsilon_4), c_2 = \frac{\sigma^2}{2\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{2\epsilon_3}, c_3 = 2(\epsilon_1 + \epsilon_3) \in \lambda = 2(\tilde{\lambda} + \epsilon_2), \text{ obtemos}^3 \\ \frac{d\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2}{dt} &+ c_1 \|u - u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 \le \lambda \|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + c_2 \|u - \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + c_3 \|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \frac{M_3^2}{2\epsilon_4} \|u - \phi\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{\alpha_{sup}^2}{2\epsilon_1} \|\nabla(u - \phi)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t} \mid u - \phi)_{\Omega}, \end{aligned}$$

ainda esta desigualdade pode ser reescrita da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \frac{d\|u-u_h\|_{L^2(\Omega)}^2}{dt} &+ c_1\|u-u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \lambda \|u-u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + (c_2 - \frac{\alpha_{sup}^2}{2\epsilon_1})\|u-\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ c_3\|u-u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_3^2}{2\epsilon_4}\|u-\phi\|_{H^1(\Omega)}^2 + 2(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t} \mid u-\phi)_{\Omega} \\ &+ \frac{\alpha_{sup}^2}{2\epsilon_1}(\|\nabla(u-\phi)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u-\phi\|_{L^2(\Omega)}^2), \end{aligned}$$

fazendo as correspondentes simplificações nesta desigualdade obtemos,

$$\frac{d\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2}{dt} + \tilde{c_1}\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \lambda \|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \tilde{c_2}\|u - \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \tilde{c_3}\|u - \phi\|_{H^1(\Omega)}^2 \\
+ 2(\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t} | u - \phi)_{\Omega}.$$

³observe-se que podemos escolher ϵ_4 tal que $c_1 < 0$.

onde,

$$\tilde{c_1} = c_1 - c_3, \tilde{c_2} = c_2 - \frac{\alpha_{sup}^2}{2\epsilon_1} \in \tilde{c_3} = \frac{M_3^2}{2\epsilon_4} + \frac{\alpha_{sup}^2}{2\epsilon_1}.$$

Multiplicando cada um dos termos desta expressão por $e^{-\lambda t}$ e considerando que

$$e^{-\lambda t} \frac{d(||u - u_h||^2_{L^2(\Omega)})}{dt} = \frac{d(e^{-\lambda t}||u - u_h||^2_{L^2(\Omega)})}{dt} + \lambda e^{-\lambda t}||u - u_h||^2_{L^2(\Omega)}$$
(4.9)

e integrando a expressão resultante de 0
a $s \in (0,T]$ em relação a t, obtemos

$$e^{-\lambda s} ||u(s,.) - u_h(s,.)||^2_{L^2(\Omega)} - ||u(0,.) - u_h(0,.)||^2_{L^2(\Omega)} + \tilde{c_1} \int_0^s e^{-\lambda t} ||u - u_h||^2_{H^1(\Omega)} dt$$

$$\leq \tilde{c_2} \int_0^s e^{-\lambda t} ||u - \phi||^2_{L^2(\Omega)} dt + \tilde{c_3} \int_0^s e^{-\lambda t} ||u - \phi||^2_{H^1(\Omega)} dt + 2 \int_0^s e^{-\lambda t} (\frac{\partial (u - u_h)}{\partial t} ||u - \phi|)_\Omega dt.$$

Observando que os lados esquerdo e direito desta expressão podem ser limitados inferiormente e superiormente por, respectivamente,

$$e^{-\lambda T} \|u(s,.) - u_h(s,.)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u(0,.) - u_h(0,.)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \tilde{c_1} \|u - u_h\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2$$
(4.10)

 \mathbf{e}

$$\tilde{c}_{2}\|u-\phi\|_{L^{2}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2}+\tilde{c}_{3}\|u-\phi\|_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2}+2\int_{0}^{s}e^{-\lambda t}(\frac{\partial(u-u_{h})}{\partial t}\mid u-\phi)_{\Omega}dt.$$
 (4.11)

para isto temos utilizado o fato que $\tilde{c_1}<0$ e as desigualdades abaixo decorrentes de $e^{-\lambda t}<1,$

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

A nova desigualdade formada pelas desigualdades (4.10) e (4.11) é dada, portanto, por

$$e^{-\lambda T} ||u(s,.) - u_{h}(s,.)||_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq ||u(0,.) - u_{h}(0,.)||_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \tilde{c_{1}} ||u - u_{h}||_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + \tilde{c_{2}}||u - \phi||_{L^{2}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2} + \tilde{c_{3}}||u - \phi||_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + 2\int_{0}^{s} e^{-\lambda t} (\frac{\partial(u - u_{h})}{\partial t} ||u - \phi) dt.$$

$$(4.12)$$

Integrando por partes a integral que aparace nesta desigualdade temos,

$$\int_{0}^{s} \left(\frac{\partial (u(t, .) - u_{h}(t, .))}{\partial t} \mid e^{-\lambda t} (u(t, .) - \phi(t, .)) \right) dt = (u(t, .) - u_{h}(t, .)) e^{-\lambda t} (u(t, .) - \phi(t, .))) |_{0}^{s} + \int_{0}^{s} e^{-\lambda t} \{\lambda (u(t, .) - u_{h}(t, .)) | u(t, .) - \phi_{h}(t, .)) - (u(t, .) - u_{h}(t, .)) | \frac{\partial (u(t, .) - \phi_{h}(t, .))}{\partial t}) \} dt$$

Aplicando a desigualdade de Hölder em cada uma das parcelas do lado direito desta desigualdade, bem como a desigualdade (2.6) em cada uma dos termos resultantes e uma vez que $e^{-\lambda s}<1$ obtemos

$$\begin{split} \int_{0}^{s} & \left(\frac{\partial(u(t,.)-u_{h}(t,.))}{\partial t} \mid e^{-\lambda t}(u(t,.)-\phi(t,.))\right) dt \leq \epsilon \|u(s,.)-u_{h}(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ &+ \epsilon \|u_{0}-u_{h_{0}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \epsilon(\lambda+1) \int_{0}^{s} \|u(t,.)-u_{h}(t,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} dt + \frac{1}{4\epsilon} \|(u(s,.)-\phi(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ &+ \frac{1}{4\epsilon} \{\|u_{0}-\phi(0,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \int_{0}^{s} [\|u(t,.)-\phi(t,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\frac{\partial(u(t,.)-\phi(t,.))}{\partial t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}] dt \}, \end{split}$$

esta desigualdade permite reescrever a relação (4.12) da seguinte forma

$$e^{-\lambda T} \|u(s,.) - u_{h}(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq \|u(0,.) - u_{h}(0,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \tilde{c_{1}} \|u - u_{h}\|_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + \tilde{c_{2}}\|u - \phi\|_{L^{2}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2} + \tilde{c_{3}}\|u - \phi\|_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + 2\epsilon\|(u(s,.) - u_{h}(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + 2\epsilon\|u_{0} - u_{h_{0}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + 2\epsilon(\lambda + 1)\int_{0}^{s}\|u(t,.) - u_{h}(t,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} dt + \frac{1}{2\epsilon}\|(u(s,.) - \phi(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{1}{2\epsilon}\{\|u_{0} - \phi_{0}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \int_{0}^{s}[\|u(t,.) - \phi(t,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\frac{\partial(u(t,.) - \phi(t,.))}{\partial t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}] dt\}.$$
(4.13)

As parcelas do lado direito desta desigualdade são majoradas como segue

(i)
$$\|u(s,.) - u_h(s,.)\|_{L^2(\Omega)}^2 \le \|u - u_h\|_{L^{\infty}(0,T;L^2(\Omega))}^2,$$

(ii) $\int_0^s \|u(t,.) - u_h(t,.)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \le \|u - u_h\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2,$
(iii) $\int_0^s \|u(t,.) - \phi(t,.)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \le \|u - \phi\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2,$
(iv) $\int_0^s \|\frac{\partial (u(t,.) - \phi(t,.))}{\partial t}\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \le \|\frac{\partial (u - \phi)}{\partial t}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2,$

desta forma, (4.13) pode ser expressa como

$$e^{-\lambda T} \|u(s,.) - u_{h}(s,.)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq (1 + 2\epsilon + \frac{1}{2\epsilon}) \|u_{0} - u_{h_{0}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \frac{1}{2\epsilon} \|u - \phi\|_{L^{\infty}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2} \\ + \frac{1}{2\epsilon} \|u - \phi\|_{L^{\infty}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2} + (\tilde{c_{2}} + \tilde{c_{3}} + \frac{1}{2\epsilon}) \|u - \phi\|_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + 2\epsilon \|u - u_{h}\|_{L^{\infty}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2} \\ - (\tilde{c_{1}} - 2\epsilon(\lambda + 1)) \|u - u_{h}\|_{L^{2}(0,T;H^{1}(\Omega))}^{2} + \frac{1}{2\epsilon} \|\frac{\partial(u - \phi)}{\partial t}\|_{L^{2}(0,T;L^{2}(\Omega))}^{2}.$$

$$(4.14)$$

Tomando o supremo desta desigualdade em $t\in(0,T)$, uma vez que seu limitante superior não depende de t, após algumas manipulações algébricas e para $\epsilon<\frac{1}{2}$ temos,

$$\begin{aligned} \|u - u_h\|_{L^{\infty}(0,T;L^2(\Omega))}^2 &\leq e^{\lambda T} (C_0 \|u_0 - u_{h_0}\|_{L^2(\Omega)}^2 - C_1 \|u - u_h\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 \\ &+ C_2 (\|u - \phi\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 + \|u - \phi\|_{L^{\infty}(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \|\frac{\partial (u - \phi)}{\partial t}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2). \end{aligned}$$

onde,

$$C_0 = \frac{1 + 2\epsilon + \frac{1}{2\epsilon}}{1 - 2\epsilon}, C_1 = \frac{\tilde{c_1} - 2\epsilon(\lambda + 1)}{1 - 2\epsilon} \quad e \quad C_2 = \frac{\tilde{c_2} + \tilde{c_3} + \frac{1}{2\epsilon}}{1 - 2\epsilon}.$$

Observe-se que a cota superior do erro cresce exponencialmente com o valor T. Do ponto de vista teórico isto indica uma dificuldade para as realizações de estimativas para períodos demasiado prolongados, o que não é o caso, pois o tipo de processos aqui analisados acontecem em intervalos de tempo relativamente curtos. Douglas e Doupont [8] obtém outro limitante para estimar o erro independemente de T para o caso não linear e sob a hipótese de *a* ser continuamente Lipstziana em v, também os autores fazem algumas observações e simplificações decorrentes do caso em que a equação é linear.

Observe-se que mesmo que o termo que contém a derivada não seja suficientemente pequeno, em média podemos afirmar que a menos de uma constante, a solução de Galerkin u_h aproxima-se da solução u tanto quanto possível através de funções em um espaço finito dimensional no qual se requer achá-la.

4.2 Crank-Nicolson

A discretização temporal de (4.3), feita através do método de diferenças finitas de Crank-Nicolson propocionará uma solução aproximada U. Para tal, consideramos a formulação desta equação em termos de $t = (m + \frac{1}{2})\Delta t$ onde m é inteiro não negativo e Δt é o passo no tempo.

Para efeitos desta discretização iremos considerar as seguintes aproximações para cada $\mathbf{x} \in \Omega$ fixo e arbitrário:

$$u(t_{m+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) = \frac{u(t_{m+1}, \mathbf{x}) + u(t_m, \mathbf{x})}{2} + \xi_m,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_{m+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) = \frac{u(t_{m+1}, \mathbf{x}) - u(t_m, \mathbf{x})}{\Delta t} + \zeta_m,$$

aproximações tais que ξ_m e ζ_m são $\vartheta(\Delta t^2)$. E, para $\mathbf{x} \in \Gamma$,

$$u(t_{m+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) = \frac{u(t_{m+1}, \mathbf{x}) + u(t_m, \mathbf{x})}{2} + \tilde{\xi}_m.$$
(4.15)

Vamos supor que:

- (i) para $\mathbf{x} \in \overline{\Omega}$ fixo e arbitrário, $u(., \mathbf{x})$ é três vezes diferenciável em relação a t.
- (ii) $\frac{\partial^{k+1}u}{\partial t^k x_i}$, k = 0, 1, 2; i = 1, 2, 3 sejam contínuas em $\bar{\Omega}_T, \Omega_T = (0, T) \times \Omega$.

Substituindo as equivalências acima em (4.3) e adotando a notação $f_m = f(t_m, \mathbf{x})$, temos

$$\left(\frac{u_{m+1} - u_m}{\Delta t} + \zeta_m | v\right) + a(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v) = (f(t_{m+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) | v), \forall v \in V,$$
(4.16)

com u_0 dada como condição inicial. Denotemos por U a solução obtida ao aplicarmos o Método de Galerkin e Crank-Nicolson a (4.3). Então,

$$\left(\frac{U_{m+1} - U_m}{\Delta t} | v_h\right) + a\left(\frac{U_{m+1} + U_m}{2}, v_h\right) = \left(f(t_{m+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) | v_h\right), \forall v_h \in V_h.$$
(4.17)

Sendo $(U_0|v_h) = (u_0|v_h), \forall v_h \in V_h$, tal como foi feito na seção anterior, subtraímos as equações (4.17) de (4.16), considerando previamente $v = v_h$ e obtemos

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

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

$$\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}+\zeta_m|v_h\right)+a(u_{m+\frac{1}{2}}+\xi_m,v_h)-a(U_{m+\frac{1}{2}},v_h)=0,\forall v_h\in V_h.$$
(4.18)

Analogamente, como foi feito na seção anterior, consideramos $v_h=(\phi-U)_{m+\frac{1}{2}}$ ou, equivalentemente,

$$v_h = (\phi - u)_{m + \frac{1}{2}} + z_{m + \frac{1}{2}}$$

onde $\phi \in L^2(0,T;V_h)$. A substituição desta na equação precedente, após algumas manipulações algébricas, nos proporciona

$$\frac{\|z_{m+1}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \|z_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}}{2\Delta t} + a(z_{m+\frac{1}{2}}, z_{m+\frac{1}{2}}) = \left(\frac{z_{m+1} - z_{m}}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega} - (\zeta_{m}|v_{h})_{\Omega} - a(\xi_{m}, v_{h}) + a(z_{m+\frac{1}{2}}, (u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}). \quad (4.19)$$

para isto, foram consideradas as seguintes relações,

(i)
$$\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t} + \zeta_m | v_h \right)_{\Omega} = \left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t} | z_{m+\frac{1}{2}} \right)_{\Omega} + \left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t} | (\phi - u)_{m+\frac{1}{2}} \right)_{\Omega} + \left(\zeta_m | v_h \right)_{\Omega},$$

uma vez que o primeiro termo do lado direito desta relação é equivalente a

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

temos

(ii)
$$\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}+\zeta_m|v_h\right)_{\Omega} = \frac{\|z_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|z_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}^2}{2\Delta t} + \left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(\phi-u)_{m+\frac{1}{2}}\right)_{\Omega} + (\zeta_m|v_h)_{\Omega} e^{-\frac{z_m}{2}}$$

$$(\text{iii})a(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v_h) - a(U_{m+\frac{1}{2}}, v_h) = a(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v_h) - a(u_{m+\frac{1}{2}}, v_h) + a(z_{m+\frac{1}{2}}, v_h) = a(\xi_m, v_h) - a(z_{m+\frac{1}{2}}, (u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}) + a(z_{m+\frac{1}{2}}, z_{m+\frac{1}{2}}).$$

Agora, vamos fazer estimativas relativas aos termos da expressão 4.19. Com auxílio da relação estabelecida na seção anterior, temos

$$\begin{aligned} |a(z_{m+\frac{1}{2}} \quad , \quad (u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})| &\leq (\epsilon_{1}+\epsilon_{3}) \|\nabla z_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{\alpha_{sup}^{2}}{4\epsilon_{1}} \|\nabla (u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{2} \|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ &+ \quad (\frac{\sigma^{2}}{4\epsilon_{2}} + \frac{M_{2}^{2}}{4\epsilon_{3}}) \|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{4} \|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \frac{M_{3}^{2}}{4\epsilon_{4}} \|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}. \end{aligned}$$

Também,

$$\begin{aligned} -a(\xi_m, v_h) &= a(\xi_m, (U - \phi)_{m + \frac{1}{2}}) = a(\xi_m, (u - \phi)_{m + \frac{1}{2}} - z_{m + \frac{1}{2}}) \\ &\leq (\tilde{\epsilon}_1 + \tilde{\epsilon}_3) \|\nabla \xi_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\alpha_{sup}^2}{4\tilde{\epsilon}_1} (\|\nabla (u - \phi)_{m + \frac{1}{2}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla z_{m + \frac{1}{2}}\|_{L^2(\Omega)}^2) \\ &+ (\frac{\sigma^2}{4\tilde{\epsilon}_2} + \frac{M_2^2}{4\tilde{\epsilon}_3}) (\|(u - \phi)_{m + \frac{1}{2}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|z_{m + \frac{1}{2}}\|_{L^2(\Omega)}^2) + \tilde{\epsilon}_4 \|\xi_m\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &+ \frac{M_3^2}{4\tilde{\epsilon}_4} (\|(u - \phi)_{m + \frac{1}{2}}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|z_{m + \frac{1}{2}}\|_{H^1(\Omega)}^2) + \tilde{\epsilon}_2 \|\xi_m\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Finalmente, para a segunda parcela do lado direito de 4.19,

$$-(\zeta_m|v_h) = (\zeta_m|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}} - z_{m+\frac{1}{2}}) \le \epsilon_5 ||\zeta_m||_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{4\epsilon_5} \{||(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}||_{L^2(\Omega)}^2 + ||z_{m+\frac{1}{2}}||_{L^2(\Omega)}^2 \}.$$

A partir destas três últimas desigualdades vemos que a expressão do lado direito de 4.19 é majorada por

$$\mu_{1} \|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \mu_{2}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \mu_{3}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \mu_{4}\|\nabla(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}
+ \mu_{5}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \mu_{6}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + (\tilde{\epsilon_{1}}+\tilde{\epsilon_{3}})\|\nabla\xi_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \tilde{\epsilon_{2}}\|\xi_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}
+ \tilde{\epsilon_{4}}\|\xi_{m}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5}\|\zeta_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + (\frac{z_{m+1}-z_{m}}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega}$$
(4.20)

onde,

(i)
$$\mu_1 = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1}$$

(ii) $\mu_2 = \epsilon_2 + \frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3} + \frac{1}{4\epsilon_5}$
(iii) $\mu_3 = \epsilon_4 + \frac{M_3^2}{4\epsilon_4}$
(iv) $\mu_4 = \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1} + \frac{\alpha_{sup}^2}{4\epsilon_1}$

$$(\mathbf{v})\mu_5 = \frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3} + \frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3} + \frac{1}{4\epsilon_5}$$
$$(\mathbf{vi})\mu_6 = \frac{M_3^2}{4\epsilon_4} + \frac{M_3^2}{4\epsilon_4}$$

Uma cota inferior para o lado esquerdo de 4.19 é dada por:

$$\frac{\|z_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|z_m\|_{L^2(\Omega)}^2}{2\Delta t} + \beta \| z_{m+\frac{1}{2}} \|_{H^1(\Omega)}^2 - \tilde{\lambda} \| z_{m+\frac{1}{2}} \|_{L^2(\Omega)}^2.$$
(4.21)

aqui uma vez mais, temos utilizamos a relação

$$a(z_{m+\frac{1}{2}}, z_{m+\frac{1}{2}}) \ge \beta \parallel z_{m+\frac{1}{2}} \parallel^{2}_{H^{1}(\Omega)} -\tilde{\lambda} \parallel z_{m+\frac{1}{2}} \parallel^{2}_{L^{2}(\Omega)}.$$

$$(4.22)$$

Assim, as desigualdades (4.19) e (4.20) dão lugar à seguinte nova desigualdade,

$$\frac{\|z_{m+1}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \|z_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}}{2\Delta t} + (\beta - \mu_{1})\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \leq (\mu_{2} + \tilde{\lambda})\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ + \mu_{3}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + (\mu_{4} + \mu_{5} + \mu_{6})\|(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \\ + (\tilde{\epsilon}_{1} + \tilde{\epsilon}_{2} + \tilde{\epsilon}_{3} + \tilde{\epsilon}_{4})\|\xi_{m}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5}\|\zeta_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ + (\frac{z_{m+1} - z_{m}}{\Delta t}|(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega}.$$

Observando que $||z_{m+\frac{1}{2}}||_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{||z_{m+1}||_{L^2(\Omega)}^2 + ||z_m||_{L^2(\Omega)}^2}{2}$, temos que após várias manipulações algébricas a expressão anterior pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} [1 - \Delta t(\mu_2 + \tilde{\lambda})] \|z_{m+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(\beta - \mu_1 - \mu_3)\Delta t\|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &\leq [1 + \Delta t(\mu_2 + \tilde{\lambda} + 1)] \|z_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\Delta t(\mu_4 + \mu_5 + \mu_6)\|(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ &+ 2\Delta t[(\tilde{\epsilon_1} + \tilde{\epsilon_2} + \tilde{\epsilon_3} + \tilde{\epsilon_4})\|\xi_m\|_{H^1(\Omega)}^2 + \epsilon_5\|\zeta_m\|_{L^2(\Omega)}^2] - \Delta t\|z_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ 2\Delta t(\frac{z_{m+1} - z_m}{\Delta t}|(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega} \end{aligned}$$

Fazendo,

(i)
$$c_1(\Delta t) = 1 - \Delta t(\mu_2 + \tilde{\lambda}),$$

(ii) $c_2(\Delta t) = 1 + \Delta t(\mu_2 + \tilde{\lambda} + 1), e$
(iii) $c_3 = 2(\beta - \mu_1 - \mu_3),$

a desigualdade acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} c_{1}(\Delta t) \|z_{m+1}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} &+ c_{3}\Delta t \|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \leq c_{2}(\Delta t) \|z_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + 2\Delta t (\frac{z_{m+1}-z_{m}}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega} \\ &+ 2\Delta t (\mu_{4}+\mu_{5}+\mu_{6}) \|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} - \Delta t \|z_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \\ &+ 2\Delta t [(\tilde{\epsilon_{1}}+\tilde{\epsilon_{2}}+\tilde{\epsilon_{3}}+\tilde{\epsilon_{4}}) \|\xi_{m}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5} \|\zeta_{m}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}]. \end{aligned}$$

Definamos a função $F(\Delta t) = \frac{c_1(\Delta t)}{c_2(\Delta t)}$. Então é possível mostrarmos que existem constantes positivas $\tilde{l} \in \tilde{L}$ tais que $\tilde{l} \leq F(\Delta t) \leq \tilde{L} < 1$, para $\delta \Delta t \in I$ para algum intervalo I. Ainda podemos afirmar que, para esse mesmo I, existem constantes positivas $l \in L$ tais que

$$l \le (F(\Delta t))^m c_2^{-1} \le L < 1.$$

Multiplicando a desigualdade acima por $(F(\Delta t))^m c_2^{-1}$ temos,

$$(F(\Delta t))^{m+1} ||z_{m+1}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} - (F(\Delta t))^{m} ||z_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + lc_{3}\Delta t ||z_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} \leq 2L\Delta t(\mu_{4} + \mu_{5} + \mu_{6}) ||(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} - l\Delta t ||z_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + 2L\Delta t[(\tilde{\epsilon}_{1} + \tilde{\epsilon}_{2} + \tilde{\epsilon}_{3} + \tilde{\epsilon}_{4}) ||\xi_{m}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5} ||\zeta_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}] + 2\Delta t(F(\Delta t))^{m} c_{2}^{-1} (\frac{z_{m+1} - z_{m}}{\Delta t} |(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega}.$$

Realizando o somatório $\sum_{m=0}^{M-1}$ nos termos desta desigualdade e observando que:

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

obtemos

$$(F(\Delta t))^{M} ||z_{M}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + lc_{3}\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} ||z_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} - ||z_{0}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$

$$\leq L\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} [2(\mu_{4} + \mu_{5} + \mu_{6})||(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} - \frac{l}{L}||z_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}]$$

$$+ 2L\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} [(\tilde{\epsilon}_{1} + \tilde{\epsilon}_{2} + \tilde{\epsilon}_{3} + \tilde{\epsilon}_{4})||\xi_{m}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5}||\zeta_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}]$$

$$+ 2\Delta t c_{2}^{-1} \sum_{m=0}^{M-1} (\frac{z_{m+1} - z_{m}}{\Delta t}|(F(\Delta t))^{m}(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}})_{\Omega}. \qquad (4.23)$$

observando que a última parcela do lado direito da desigualdade acima é equivalente a

$$2 \quad \Delta t c_2^{-1} \sum_{m=1}^{M-1} (z_m | \frac{(F(\Delta t))^{m-1} (u-\phi)_{m-\frac{1}{2}} + (F(\Delta t))^m (u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}) \\ + \quad 2 c_2^{-1} [(z_M | (F(\Delta t))^{M-1} (u-\phi)_{M-\frac{1}{2}}) - (z_0 | (u-\phi)_{\frac{1}{2}})] \\ \leq \quad 2 \Delta t c_2^{-1} \sum_{m=1}^{M-1} (\delta_1 ||z_m ||_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{4\delta_1(\Delta t)^2} ||(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}} - (u-\phi)_{m-\frac{1}{2}} ||_{L^2(\Omega)}^2) \\ + \quad 2 c_2^{-1} [\delta_2 ||z_M ||_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{4\delta_2} ||(u-\phi)_{M-1} ||_{L^2(\Omega)}^2 + \delta_3 ||z_0 ||_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{4\delta_3} ||(u-\phi)_{\frac{1}{2}} ||_{L^2(\Omega)}^2]$$

esta última desigualdade decorre das desigualdades de Cauchy-Schwarz e a desigualdade básica (2.6).

Portanto (4.22) pode ser expressada como,

$$(F(\Delta t))^{M} - \frac{2\delta_{2}}{c_{2}}) ||z_{M}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + lc_{3}\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} ||z_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2}$$

$$\leq 2L\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} [(\mu_{4} + \mu_{5} + \mu_{6})||(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}||_{H^{1}(\Omega)}^{2}] + (1 + 2c_{2}^{-1}\delta_{3})||z_{0}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$

$$+ 2L\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} [(\tilde{\epsilon_{1}} + \tilde{\epsilon_{2}} + \tilde{\epsilon_{3}} + \tilde{\epsilon_{4}})||\xi_{m}||_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \epsilon_{5}||\zeta_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}]$$

$$+ \Delta t \sum_{m=1}^{M-1} ((2c_{2}^{-1}\delta_{1} - l)||z_{m}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{c_{2}^{-1}}{2\delta_{1}(\Delta t)^{2}}||(u - \phi)_{m+\frac{1}{2}} - (u - \phi)_{m-\frac{1}{2}}||_{L^{2}(\Omega)}^{2})$$

$$+ \frac{1}{2\delta_{2}c_{2}}||(u - \phi)_{M-1}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{1}{2\delta_{3}c_{2}}||(u - \phi)_{\frac{1}{2}}||_{L^{2}(\Omega)}^{2} - l\Delta t||z_{0}||_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$

Finalmente uma vez $c_2 > 1$, então $2c_2^{-1}\delta_1 - l < 2\delta_1 - l$, após a correspondente majoração escolhendo $\delta_1 = \frac{l}{2}$ podemos concluir que

$$a_{1} \|z_{M}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + lc_{2}^{-1}c_{3}\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} \|z_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + 2L\Delta t \sum_{m=0}^{M-1} a_{2} \|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}$$

$$\leq \frac{c_{2}^{-1}}{2\delta_{1}(\Delta t)^{2}} \sum_{m=1}^{M-1} \|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}} - (u-\phi)_{m-\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + a_{3} \|(u_{0}-\phi(0,.))\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$

$$+ \frac{1}{2\delta_{2}c_{2}} \|(u-\phi)_{M-1}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{1}{2\delta_{3}c_{2}} \|(u-\phi)_{\frac{1}{2}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \vartheta(\Delta t)^{5}$$

uma vez que $||z_0||^2_{L^2(\Omega)} = ||u_0 - U_0||^2_{L^2(\Omega)} \le ||u_0 - \phi(0, .)||^2_{L^2(\Omega)}$ e onde

(i)
$$a_1 = (F(\Delta t))^M - \frac{2\delta_2}{c_2}),$$

(ii) $a_2 = (\mu_4 + \mu_5 + \mu_6) e$

(ii)
$$a_2 = (\mu_4 + \mu_5 + \mu_6)$$
 e

(i)
$$a_3 = (1 + 2c_2^{-1}\delta_3 - l\Delta t).$$

Em outras palavras, com este resultado, obtem-se um limitante como aquele que foi obtido em (4.1), agora para a aproximação de Galerkin discreto, garantindo a qualidade das aproximações numéricas pelos métodos escolhidos.

Capítulo 5 RESULTADOS: Cenários e simulações

Este capítulo é destinado à criação de cenários típicos¹ com o propósito de simular a dispersão dos contaminantes presentes nos efluentes líquidos provenientes da atividade *offshore*.

Uma das maiores dificuldades na Modelagem Matemática é a obtenção dos parâmetros, pois nem sempre dispõe-se de dados na literatura que permitam estimá-los. Desta maneira, a fase de calibração do modelo nem sempre é possível, a não ser através de ajustes numéricos.

Devido à natureza diferente dos diversos compostos da água de produção, o estudo do comportamento espaço-temporal da pluma de água de produção é feito como em [22] e [13], através da análise individual dos grupos de constituintes mais representativos levando em consideração suas características físico-químicas durante sua descarga no ambiente aquático. Estes grupos serão comentados em detalhes na seção (5.2).

5.1 Os parâmetros

Nem todos os parâmetros adotados são da literatura citada. Alguns foram calibrados, ainda que qualitativamente, com o uso do modelo. Neste sentido, os resultados obtidos e apresentados nas próximas seções tem um efeito de teste e espera-se, portanto, que venham a fornecer aproximações a situações reais pelo ponto de vista de simulações qualitativas.

 $^{^1{\}rm embora}$ sem acesso a todos os parâmetros envolvidos. Conseqüentemente alguns destes foram estimados.

5.1.1 Parâmetros da discretização espacial

Nos diversos conjuntos de cenários é feita uma discretização do domínio Ω , atribuindo aos parâmetros do domínio os seguintes valores: As dimensões adotadas aqui baseiam-se em

Parâmetros	Valores (km)
a	1,8
b	0,9
с	0,15
dx (nx=18)	0,1
dy (ny=9)	0,1
dz (nz =3)	0,05

Tabela 5.1: Parâmetros da discretização espacial do domínio, conforme a Fig 1.3

valores que descrevam aproximadamente a região circunscrita à unidade de produção que virá a ser, aliás, a região atingida pela água de produção de acordo com Kennicut *et al* [13] bem como com Johnsen *et al* [22]. Nas diferentes simulações o tamanho do passo do tempo adotado foi dt=0,03125, valor que foi obtido considerando uma hora de simulação equivalente a 32 iterações (ou passos) no tempo.

5.1.2 Parâmetros do modelo

Como já foi comentado no Capítulo 1, as diversas substâncias que constituem a água de produção possuem, além de diferentes pesos moleculares, diferentes capacidades degradativas e difusivas.

As taxas de degradação biológica σ dos principais constituintes da água de produção consideradas nos diferentes cenários da próxima seção, serão assumidas variáveis apenas com a profundidade. De tal forma que:

$$\sigma(z) = \begin{cases} \sigma_1 & 0 \le z < \frac{c}{3} \\ \sigma_2 & \frac{c}{3} \le z < \frac{2c}{3} \\ \sigma_3 & \frac{2c}{3} \le z \le c, \end{cases}$$

onde σ_1, σ_2 e σ_3 são constantes cujos valores são atribuidos de acordo com a natureza da substância em questão.

Não obstante as concentrações dos compostos orgânicos, inorgânicos e do óleo serem totalmente diferentes durante a descarga da água produzida, nos diversos cenários assumiremos que a concentração deles é a mesma apenas para efeitos de comparação e análise do comportamento transiente destas substâncias.

5.1.3 Campos de velocidades

Para gerar o campo de velocidades W_1 do mar devido à circulação local, às marés e aos ventos foram consideradas as seguintes condições de fronteira:

$$V(x, y, z) = g(x, y, z) = (v_1, v_2(x, z), v_3), \forall (x, y, z) \in \partial\Omega,$$
(5.1)

com $v_2(x, z) = \frac{V_0 x(2b-x) z(2c-z)}{(bc)^2}$, onde V_0 é uma constante dada representando o maior valor do perfil quadrático da velocidade. As outras componentes $v_1 e v_3$ são constantes e iguais a $0,019\frac{m}{s} e 0\frac{m}{s}$ respectivamente. Para emular o efeito da maré atuando no sentido do eixo x, ortogonal à costa, fazemos variar o sinal de v_1 . Os valores das velocidades que nós



Figura 5.1: Esboço do campo que atua na fronteira do domínio Ω .

consideramos para gerar o campo de velocidades devido à correnteza e à maré são compatíveis com aqueles utilizados nas simulações do modelo PROVANN no citado trabalho de Rye *et al.* No entanto, o campo de velocidades usado nesse trabalho é considerado como sendo uniforme, uma limitação que nosso trabalho não adota. No caso do campo W_2 o qual é induzido pela natureza gravitatória das diferentes substâncias contaminantes, que fazem seu ingresso no mar através da fonte f, é considerado de tal forma que $W_2(x, y, z) = (0, 0, w_3)$, onde w_3 é constante e seu valor dependerá exclusivamente da natureza da substância a ser analisada, podendo ser positiva, negativa ou nula conforme os correspondentes cenários abordados na próxima seção.

Para efeitos de uma melhor visualização e uma adequada análise dos resultados das diferentes simulações, exibe-se o comportamento espaço-temporal da concentração de cada substância, num mesmo nível de altura z. Para todos os diferentes cenários foram considerados os níveis correspondentes a $z = 0, z = \frac{c}{3}, z = \frac{2c}{3}$ e z = c sendo que o primeiro e o último nível correspondem ao fundo do mar e à superfície respectivamente.

5.2 Dispersão de óleo: Cenário 1

O óleo disperso é um dos constituintes da água de produção que mais recebe atenção por parte das entidades de fiscalização do meio ambiente. Está presente em pequenas gotículas e encontra-se suspenso na fase aquosa. Sua concentração na água de produção depende da sua densidade, da tensão superficial entre o óleo e as fases da água, do tipo e eficiência do tratamento químico (ver [29]). A natureza físico-química desta substância permite, neste cenário, considerarmos que não há maior influência da força gravitatoria sobre ele, i.e., a componente vertical do campo W_2 é nula.

Parâmetro do Modelo	Valor
Difusividade(α)	$0,83m^2/s$
$Decaimento(\sigma)$	$\sigma_1 = \sigma_2 = 5,5x10^{-6}/s, \sigma_3 = 2,7x10^{-5}/s$
Permeabilidade (k_N)	$k_2 = k_6 = 0, k_N = V \circ \eta_N(m/s)$
Vazão (fonte)	1 (g/l)/s

Tabela 5.2: Parâmetros utilizados na simulação do óleo disperso

Ressaltamos que neste cenário a fonte ficou ligada durante as três primeiras horas. Os valores adotados para a difusividade e o decaimento são da mesma ordem de grandeza que aqueles utilizados nos trabalhos de Cantão [2], De Oliveira [6], para simular a dispersão de uma mancha de oleo. Rye *et al* [21] utilizam $\frac{10m^2}{s}$ e $\frac{10m^{-4}}{s}$ para a difusão horizontal e vertical respectivamente.

5.2.1 Comentários dos resultados do cenário 1

Na Figura 5.2, os gráficos (a) mostram que após três horas, a concentração do óleo na região que corresponde a $z = \frac{c}{3}$ é maior que na altura correspondente a $z = \frac{2c}{3}$ e a concentração de óleo nesta profundidade é maior do que na superfície (z = c). Como



Figura 5.2: Concentração de óleo disperso 1.1

a correnteza decresce com a profundidade, então a substância se dispersa mais na superfície do que em qualquer outro nível de profundidade provocando desta maneira uma menor concentração. Outro fator que contribui para isto é que a taxa de degradação é maior na superfície. Além disso, nos três casos temos um deslocamento da pluma, predominante na direção do eixo y, e isto se deve à correnteza ser predominante nessa direção.

Os gráficos (b) desta mesma figura correspondem à concentração do óleo na superfície após uma, duas e três horas respectivamente. Claramente apreciam-se os efeitos de difusão e de transporte ao longo do tempo, uma vez que a fonte mantem-se ligada constantemente durante estas três horas.

Ainda na Figura 5.3, os pontos p1, p2 e p3 correspondentes aos nós 314, 2802 e 4046,



Figura 5.3: Concentração de óleo disperso 1.2

localizados nos níveis de altura $z = 0, z = \frac{2c}{3}$ e z = c respectivamente mostram que a concentração (pontual) de óleo cresce com o decorrer do tempo, comportamento este que condiz com o fato da fonte permanecer ligada durante todo o intervalo de tempo.

As linhas de contorno gráficos (d) na Figura 5.3 dão uma idéia do comportamento espacial da pluma após 3 horas. Ilustram o fato da mancha formada pelo óleo apresentar uma maior extensão conforme nos aproximamos da superfície.

5.3 Dispersão de hidrocarbonetos poliaromáticos (PAHs): Cenário 2

A temperatura e o ph da água do mar podem afetar a solubilidade dos compostos orgânicos, os quais são de difícil remoção da água de produção, e, portanto, presentes

na pluma. Tal como foi comentado na seção (1.2) a concentração destes na água de produção é maior na medida em que o composto é de menor peso molecular $(C_2 - C_5)$, o que por sua vez facilita sua solubilidade na água e acaba mascarando sua alta concentração em água produzida.

Dentre os diferentes Compostos Orgânicos, consideramos neste cenário o grupo do Hidrocarbonetos Poliaromáticos (PAHs) de baixo peso molecular (menos de 4 anéis de Benzeno). Apesar dos fenóis serem apontados como os compostos que mais contribuem para a toxicidade por interferirem no potencial de reprodução de certos organismos, em compensação, são degradados rapidamente pelas bactérias e pela foto-oxidação tanto no oceano quanto em sedimentos marinhos (Stephenson, 1992, *in* [29]).

Parâmetro do Modelo	PAHs(2-3 Anéis)
Difusividade(α)	$1.1m^2/s$
$Decaimento(\sigma)$	$\sigma_1 = \sigma_2 = 8,3x10^{-6}/s, \sigma_3 = 4,16x10^{-6}/s$
$Permeabilidade(k_N)$	$k_2 = k_6 = 0, k_N = V \circ \eta_N(m/s)$
Vazão (fonte)	1 (g/l)/s

Para estes compostos adotamos os parâmetros conforme a tabela abaixo.

Tabela 5.3: Parâmetros dos PAHs

Sendo estes compostos naturalmente leves devido a seu pouco peso molecular, então é de se esperar que o empuxo predomine sobre a força gravitatória o qual fará com que a componente vertical w_3 do campo W_2 aponte para cima. Para tal, neste cenário, consideramos $w_3 = 0, 11m/s$ e, adicionalmente, consideramos que a fonte é desligada após permanecer ligada por duas horas.

5.3.1 Comentários dos resultados do cenário 2

Os gráficos (a) da Figura 5.4 revelam que, durante as duas horas em que a fonte ficou ligada, praticamente não houve maior influência do campo de velocidades W_1 e sim o predomínio do campo W_2 , o que provocou que a concentração dos PHAs tivesse um menor raio de abrangência em todos os níveis apresentados. O fato da concentração na superfície ser menor que no nível imediatamente abaixo se deve a que na superfície, a taxa de degradação σ é maior que em qualquer outro nível, bem como o fato desta região estar mais afastada da fonte.

Como era de se esperar, uma vez desligada a fonte, as concentrações sofrem uma diminuição conforme o ilustram os gráficos (b) ainda na Figura 5.4. Sendo que esta decai com o tempo e com a profundidade da região observada. A particularidade dos traçados dos gráficos do MatLab exibe manchas maiores nestes gráficos, mas os totais de concentração são significativamente menores, da ordem 10^{-3} em (b). Observe-se também que tanto o



Figura 5.4: Concentração de PAHs 2.1

deslocamento e a região de abrangência são muito maiores durante a quarta hora do que durante a terceira hora, e isto se deve, primero, à componente v_2 do campo de velocidades ser maior à medida que nos afastamos da costa e, segundo, aos efeitos da difusão efetiva.

Os gráficos (c) e (d) da Figura 5.5, que correspondem aos comportamentos transientes das concentracões dos PAHs nos níveis z = c e $z = \frac{2c}{3}$ respectivamente após 6, 7 e 8 horas, mostram que há uma tendência à uniformização da concentração em ambos os níveis, porém sendo esta mais rápida na superfície do que no nível $z = \frac{2c}{3}$. Observe-se ainda que a concentração neste último nível é ligeiramente menor.



Figura 5.5: Concentração de PAHs 2.2

5.4 Dispersão de metais pesados: Cenário 3

A característica predominante que diferencia os diferentes compostos deste grupo é a sua concentração na descarga da água. Metais como o Zinco, Níquel, e Cobre estão presentes em maior concentração do que, no caso, de metais como o Cádmio e Mercúrio.

Parâmetro do Modelo	Metais
Difusividade(α)	$0,27m^2/s$
$Decaimento(\sigma)$	$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 0$
$\operatorname{Permeabilidade}(k_N)$	$k_2 = k_6 = 0, k_N = V \circ \eta_N \ ({ m m/s})$
Vazão (fonte)	1 (g/l)/s

Tabela 5.4: Parâmetros dos metais pesados



Figura 5.6: Concentração de metais pesados 3.1

5.4.1 Comentários dos resultados do cenário 3

Analogamente aos resultados do cenário anterior, os gráficos (a) e (b) da Figura 5.6 põem em evidência a predominância do campo gravitatório durante as duas horas em que a fonte ficou ligada. Ainda, como a componente w_3 do Campo de velocidades W_2 é negativa (-0.11m/s), então isto faz com que a concentração dos metais pesados no fundo seja mais acentuada e menos dispersa na direção do eixo y. E isto fica plenamente evidente através das linhas de contorno dos gráficos (c) da Figura 5.7.

Ainda na Figura 5.7, os gráficos (d) mostram que o efeito de advecção no fundo do mar, durante as primeiras horas, é predominante na direção do eixo x, e só uma hora depois, os efeitos da difusão se fazem sentir de modo a se notar.



Figura 5.7: Concentração de metais pesados 3.2

Naturalmente, como no caso anterior, temos uma sensível diminuição da concentração dos metais pesados em todos níveis após ser desligada a fonte.

Capítulo 6 Conclusões

Os gráficos das simulações dos diferentes cenários revelam resultados compatíveis com o esperado comportamento espaço-temporal das diversas substâncias mencionadas quando influenciadas por fenômenos de difusão e dispersão, sob determinadas condicões de fronteira e seus respectivos parâmetros.

Por outro lado, este texto apresenta de modo original o tratamento teórico que leva à garantia de convergência dos métodos de Galerkin discreto e contínuo nas situações abordadas. Esta situação abrange a inclusão no modelo e no tratamento algorítmico da variabilidade do coeficiente das degradações, da dependência espaço-temporal do perfil de velocidades, e, desde que de modo adequado, da dependência de alguns dos parâmetros da própria concentração do efluente.

Um monitoramento adequado de uma plataforma *offshore* nos permitiria a obtenção de dados de campo a partir dos quais seria possível a calibração e a validação do modelo, bem como do algoritmo de aproximação das correspondentes soluções. Apesar disto, sabemos que sempre há incertezas inerentes aos dados coletados e, portanto, como futuro trabalho pretendemos realizar um tratamento *fuzzy* para os parâmetros do modelo considerado neste trabalho, obtendo, como resultados aproximados, faixas de variabilidade das concentrações.

Um dos destaques deste trabalho é a utilização de elementos finitos tridimensionais em concorcondância com as características do comportamento transiente das substâncias contidas na água de produção, que exigem por força da abordagem tridimensional, especiais atenções algorítmicas e computacionais.

Apesar de termos considerado um domínio bastante regular, é perfeitamente possível modelar o processo de dispersão da água de produção em domínios de geometrias irregulares, bastando para isto fazer pequenas modificações no programa principal cujo código numérico aparece no apêndice deste trabalho. Em outras palavras, os resultados não de-
penderam da geometria do domínio ainda que se apóiem no uso de tetraedros.

Como foi comentado, as entidades de fiscalização do impacto ao meio ambiente avaliam a toxicidade da água produzida apenas através do TOG, porém a toxicidade das outras substâncias não pode ser neglicenciada. Os métodos que avaliam a qualidade da água através da quantidade acumulada por certas espécies dependem de muitos fatores gerando a necessidade de uma abordagem inicial via modelagem e simulação numérica. Portanto acreditamos que este modelo, uma vez calibrado, venha poder ser instrumento de apoio na avaliação do impacto ao ambiente marinho devido à atividade *offshore*, inclusive na fase de projetos tanto no dimensionamento das unidades quanto aos efeitos resultantes da localização.

Podemos dizer que uma das limitações na abordagem deste modelo é não ter considerado o coeficiente de difusão α como uma função da posição espacial nem como da temperatura ou da salinidade nem, ainda dependente da substância constituinte da pluma a ser simulada. Além disso, limitações de tempo não permitiram uma cuidadosa análise comparativa em termos de resultados qualitativos presentes em outros trabalhos de objetivos e métodos correlatos.

Ressaltamos que uma possível natureza descontínua da concentração da substância reforça a necessidade da utilização da formulação variacional via Métodos de Elementos Finitos.

Como sabemos, o tipo de informação requerido pelas instituições de fiscalização da qualidade ambiental deve ser tanto quantitativo como qualitativo e determinado em tempo real. Uma vez que os resultados das simulações podem ser tanto qualitativos quanto quantitativos, e que o programa demanda alguns poucos minutos (menos de 5 minutos¹) então podemos considerar este trabalho como uma ferramenta adicional na tomada de decisões e procedimentos para avaliação do impacto em ambientes marinhos devido à descarga de água de produção.

Futuros trabalhos devem incluir, de imediato, além da variabilidade da geometria dos domínios, a calibração do modelo e a paulatina sofisticação do tipo de elemento finito tridimensional, tanto no caso de mapas de circulação, quanto nos processos de advecção e difusão.

De uma maneira geral esperamos que a capacidade qualitativa e preditiva do modelo utilizado neste trabalho venha a contribuir no estudo de fenômenos que envolvem processos de dispersão e poluição no meio ambiente costeiro e de maneira geral nas atividades *offshore*.

¹Pentium 4, 2.4 GHz, 1 GB Memória Ram e Sistema Operacional Windows.

Apêndice

Apresentamos os códigos numéricos utilizados na implementação dos programas que geraram as simulações do Capítulo 5. Estes foram implementados em ambiente $MatLab^{\textcircled{R}}$ versão 6.1.

O programa abaixo constitui o programa principal responsável pela simulação dos diferentes cenários que foram objeto de estudo. Programa que por sua vez é alimentado pelos seguintes arquivos de dados:

1. malhaO2.mat: Arquivo que fornece ao programa principal a seguinte informação

a. Os nós do domínio Ω_e bem como os vértices correspondentes a cada nó.

b. A posição local e global de cada nó em relação a Ω_e assim como se o nó pertence ou não a uma fronteira específica.

2. matrigidez.mat: Este arquivo contém as diversas submatrizes que participam na construção das matrizes de rigidez, A , B e b.

Os termos relativos às integrais de superfície nas fronteiras são dados pelos arquivos:

intsupfl.mat, intsupfl.mat e intsupfl.mat. Os quais são gerados pelo programa intsupfunctestes.m

3. Campo3.mat: Contém o campo de velocidades obtido através da solução numérica das equações de Stokes.

Estes diferentes arquivos de dados são obtidos através da saída de programas também implementados em $MatLab^{(\widehat{\mathbf{R}})}$ e cujos códigos computacionais são exhibidos a continuação do programa principal.

----- Programa Principal-----

% Este programa resolve a edp.Ut-alfa(Uxx+Uyy+Uzz)+Div(VU)+dU=f %atraves de elementos finitos. Sendo V o campo de veloc. gerado % atraves das eq. de Stokes e fonte constante

clear all T = input('ingresse o numero de horas t da simulacao:');

```
alfa = input('ingresse o valor do coeficiente de difusao:');
sigma1 =input('ingresse o coeficiente de degradacao sigma1:');
sigma2 =input('ingresse o coeficiente de degradacao sigma2:');
sigma3 =input('ingresse o coeficiente de degradacao sigma3:');
vazao = input('ingresse a vazao da fonte pontual f:');
      = input('indique o no onde esta localizada a fonte f:');
qq
w3= input('indique o valor da componente vertical do campo W3');
% parametros
dt = 1/32;
% coeficientes de degradação
sigma= sigma1*ones(1:810);
sigma= sigma1*ones(811:1620);
sigma= sigma1*ones(1621:2430);
% carregando a malha
load malhaO2.mat M ind nn Nn Nnn n nx ny nz dx dy dz x y z ;
%carregando as matrizes de rigidez
load matrigidez.mat a b1 b2 b3 cxx cyy czz cxy cxz cyz d1 e ;
  % Matriz de coef( phij|phii)= a
  % Matrizes relativas a coef (phij|Vograd(phii)), b1,b2 e b3
  % Matrizes relativas a coef(Vograd(phj)|Vograd(phii)),cxx,cyy....cyz
load Campo2.mat Uo Vo Wo;
% matrizes com elementos corresp. as int. de sup. nas fronteiras
%ISFI, isfi1..matrizes relativ. as int.(phij, phii) e (phij, Vgrad(phi))
load intsupfl.mat ISFL isfl1 isfl2 isfl3;
load intsupff.mat ISFF isff1 isff2 isff3;
load intsupfi.mat ISFI isfi1 isfi2 isfi3;
% fonte
f=zeros(nn,1); pp= (2*Nn + Nnn) + (Nnn+1)/2; f(pp)=vazao;
ponto1 = (Nn+1)/2 - 2*(2*nx+1); % ponto fixo loc. no fundo
ponto2 = ponto1+ Nn + Nnn; % ponto fixo loc. em z= h/3
ponto3 = ponto2 + Nn + Nnn; % ponto fixo loc. em z= 2h/3
ponto4 = ponto3 + Nn+ Nnn; % ponto localizado em z=h
d = zeros(nn,1); 0 = zeros(10,10);
Wo= w3*ones(4435,1); % campo devido 'a gravidade
```

```
% cj(0) concentracao inical em todo o dominio
%%%%load conc3horas.mat u
u=zeros(nn,1);
%geracao das matrizes de rigidez e preenchimento das matrizes A e B
% e resolucao do sistema.
A =sparse(nn,nn); B= sparse(nn,nn); for tr =1:n
    J = zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
    for s=1:2
        J(s,1)= x(tr,2*s+1)-x(tr,1);
        J(s,2) = y(tr,2*s+1)-y(tr,1);
        J(s,3) = z(tr,2*s+1)-z(tr,1);
     end
  J(3,1)=x(tr,10)-x(tr,1); J(3,2)=y(tr,10)-y(tr,1); J(3,3)=z(tr,10)-z(tr,1);
  J11=det(J(2:3,2:3)); J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
  J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
  J13=det(J(2:3,1:2));J23=det(J(1:2:3,1:2));J33=det(J(1:2,1:2));
  vol =det(J);
  J1= [J11 J12 J13]; J2= [J21 J22 J23]; J3= [J31 J32 J33];
  % media das velocidades
  Vm = [0 \ 0 \ 0]; ig1 = M(tr, 1);
  for r = 1:10
      ig = M(tr,r);
      V = [Vo(ig) Uo(ig) Wo(ig)];
      Vm = Vm + 0.1 * V;
  end
 % Calculo das medias das veloc. no elem ref., num. de peclet e taue
     Vm = [Vm(1) - Vm(2) Vm(3)];
     S1= Vm*J1'; S2= -Vm*J2'; S3= Vm*J3';
     Vref= (1/vol)*[S1 S2 S3];
     he = (0.7*norm(Vm))/norm(Vref);
     lambdae = norm(Vm)*he/(2*alfa);
     taue = ((coth(lambdae)-1/lambdae)*he)/(2*norm(Vm));
% definicao da matriz dos coef. (grad(phij)|grad(phii)):R
  ss = J1*J1'*cxx +J2*J2'*cyy + J3*J3'*czz;
  R= (ss - J1*J2'*cxy + J1*J3'*cxz- J2*J3'*cyz)/vol;
%* Matriz de coef. ( phij|Vograd(phii) ) = Pij
   S1= Vm*J1'; S2= -Vm*J2'; S3= Vm*J3';
   P = (S1*b1 + S2*b2 + S3*b3);
   v12 = -Vm(1) * Vm(2); v13 = Vm(1) * Vm(3); v23 = -Vm(2) * Vm(3);
  %definicao da matriz dos coef. ( Vograd(phij)|Vograd(phii)):Q
 ss0 = S1^2 * cxx + S2^2 * cyy + S3^2 * czz;
```

```
ss1=-(Vm(1)^2*J11*J21+Vm(2)^2*J12*J22 +Vm(3)^2*J13*J23);
ss2= v12*(J11*J22+J12*J21)-v13*(J11*J23+J13*J21)+ v23*(J12*J23+J22*J13);
ss3= Vm(1)<sup>2</sup>*J11*J31+Vm(2)<sup>2</sup>*J12*J32 +Vm(3)<sup>2</sup>*J13*J33 ;
ss4= - v12*(J11*J32+J12*J31)+v13*(J11*J33+J13*J31)- v23*(J12*J33+J32*J13);
ss5 = -(Vm(1)^{2}J21*J31 + Vm(2)^{2}J22*J32 + Vm(3)^{2}J23*J33);
s_{s6} = v_{12} (J_{21} J_{32} + J_{22} J_{31}) - v_{13} (J_{21} J_{33} + J_{23} J_{31}) + v_{23} (J_{22} J_{33} + J_{23} J_{32});
Q = (ss0 + (ss1 + ss2) * cxy + (ss3 + ss4) * cxz + (ss5 + ss6) * cyz) / vol ;
MP = alfa*R+ taue*Q+P'+sigma(tr)*vol*a;
for i=1:10
   ig = M(tr,i);
   fr = ind(tr,i);
  % integral: fronteira frontal
   if fr==3
     ISFFP = (vol*ISFF + taue*(S1*isff1 + S2*isff2+ S3*isff3))*Vm(2);
   else
     ISFFP= 0;
   end
  % integral: fronteira posterior
   if fr ==4
    ISFFP = -(vol*ISFF + taue*(S1*isff1 + S2*isff2 + S3*isff3))*Vm(2);
    else
    ISFFP = 0;
   end
  % integral fronteira lateral esquerda
   if fr == 1
      ISFED = -(vol*ISFL+ taue*(S1*isfl1 + S2*isfl2 + S3*isfl3))*Vm(1);
    else
     ISFED = 0;
   end
    %integral fronteira lat. direita
    if fr ==5
     ISFED = (vol*ISFL+ taue*(S1*isfl1 + S2*isfl2 +S3*isfl3))*Vm(1) ;
      else
     ISFED = 0;
    end
  %integral fronteira inferior e superior
   if fr == 2 | fr == 6
     %ISFIS = (vol*ISFI+ taue*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3))*Vm(3);
     %else
     ISFIS= 0;
   end
  E=(MP+ ISFED+ ISFFP + ISFIS)*(dt/2);
```

```
aa = vol*a + taue*P + E;
        bb = vol*a + taue*P - E;
       for j=1:10
           jg = M(tr, j);
          A(ig, jg) = A(ig, jg) + aa(i, j);
          B(ig, jg) = B(ig, jg) + bb(i, j);
         end % for j
          d(ig) = d(ig) + f(ig)*(vol*e(i) + taue*P(1,i))*dt;
      end % for i
     end %for tr
     % resolver o sistema :Ac(n+1)=Bc(n)+d, com a fonte ligada
     % decomposicao da matriz A em LU
     [L,U] = lu(A); for tt = 1:32*T
       c1(tt)=u(ponto1); % concentracao num ponto ao longo do tempo em z =0
       c2(tt)=u(ponto2); % concentracao num ponto ao longo do tempo em z = h/3
       c3(tt)=u(ponto3); % concentracao num ponto ao longo do tempo em z = 2h/3
       c4(tt)=u(ponto4); % concentracao num ponto ao longo do tempo em z = h
       u = B * u + d;
       u = L \setminus u;
       u = U \setminus u;
      % rearrango dos resultados (com fonte ligada)
      if tt ==16
        C10= reshape(u(1:Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
        C11= reshape(u(Nn+Nnn+1:2*Nn+ Nnn), [2*ny+1 2*nx+1]);
        C12 = reshape(u(2*(Nn+Nnn)+1:2*Nnn+3*Nn), [2*ny+1, 2*nx+1]);
        C13= reshape(u(3*(Nn+Nnn)+1:3*Nnn+4*Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
      end
      if tt == 32
        C20= reshape(u(1:Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
        C21= reshape(u(Nn+Nnn+1:2*Nn+ Nnn), [2*ny+1 2*nx+1]);
        C22= reshape(u(2*(Nn+Nnn)+1:2*Nnn+3*Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
        C23= reshape(u(3*(Nn+Nnn)+1:3*Nnn+4*Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
      end
     end
      C30= reshape(u(1:Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
      C31= reshape(u(Nn+Nnn+1:2*Nn+ Nnn), [2*ny+1 2*nx+1]);
      C32 = reshape(u(2*(Nn+Nnn)+1:2*Nnn+3*Nn), [2*ny+1 2*nx+1]);
      C33= reshape(u(3*(Nn+Nnn)+1:3*Nnn+4*Nn),[2*ny+1 2*nx+1]);
     x=0:dx/2:0.9; y=0:dy/2:1.8; subplot 231 pcolor(x,y,C10) shading
     interp subplot 232 pcolor(x,y,C20) shading interp subplot 233
     pcolor(x,y,C30) shading interp subplot 234 Cx= contour(x,y,C10,5);
     clabel(Cx) subplot 235 Cy =contour(x,y,C20,5); subplot 236 Cz=
```

contour(x,y,C30,5);

```
-----Programa que gera a Malha -----
% Este programa gera uma malha em 3d, de dimensoes A, B e C
% sendo o numero de divisoes nx, ny e nz respectiv.
% os nos nas fronteiras F1, F2, F3, F4, F5,F6 sao ou nao incluidos
% se ki= 1 ou zero respectivamente.
                           % -----k4------
                                                                 /k5 k6: superficie sup.
/
              % k1 / k2
                     %/
                    %/----k3-----/
______
k1=1; k2=1; k3=1; k4=1; k5=1; k6=1; a =1.8; b=0.9; c =0.15;
nx=18; ny=9; nz=3; dx = a/nx; dy=b/ny; dz = c/nz; cx = a/nx; dy=b/ny; dz = c/nz; dz = c/n
dx/2; cy = dy/2; cz = dz/2; m = 5*nx; n = 5*nx*ny*nz; t
=1; for j=1:nx
        j1= (j-1)*dx; j2=(2*j-1)*cx; j3=j1+dx;
                                                                      x(t:m:n,4:2:6)= j2;
        x(t:m:n,1:3)= j1;
                                                         x(t:m:n,9)=x(t:m:n,4);
        x(t:m:n,5) = j3;
        x(t:m:n,7:3:10)=x(t:m:n,1:2); x(t:m:n,8)=x(t:m:n,1);
       x(t+1:m:n,1:3)=j3;
x(t+1:m:n,4:2:6)=x(t:m: n,4:2:6);
x(t+1:m:n,5)= j1;
x(t+1:m:n,9)=x(t+1:m:n,4);
        x(t+1:m:n,7:3:10) = x(t+1:m:n,1:2); x(t+1:m:n,8) = x(t+1:m:n,1);
        x(t+2:m:n, 1:10) = x(t+1:m:n, 1:10);
        x(t+3:m:n,1:10)=x(t:m:n,1:10);
       x(t+4:m:n,1)=j3;
                                                                        x(t+4:m:n,3:5)=j1;
       x(t+4:m:n,2:7:9)=j2; x(t+4:m:n,6:2:8)=x(t+4:m:n,2:7:9);
       x(t+4:m:n,7:3:10)=j3;
       t =t+5;
 end
 r=1; p1 = 5*nx*ny;
 for k=1:nz
     p = p1*k; o1=(k-1)*dz; o2=(2*k-1)*cz; o3=k*dz;
     z(r:5:p,1:6) = o1; z(r:5:p,7:9) = o2; z(r:5:p,10) = o3;
     z(r+1:5:p,1:10) = z(r:5:p,1:10);
```

```
z(r+2:5:p,1:6)=o3; z(r+2:5:p,7:9)=o2; z(r+2:5:p,10)=o1;
   z(r+3:5:p,1:10)=z(r+2:5:p,1:10);
   z(r+4:5:p,8:2:10)=o1;
                                  z(r+4:5:p, 2:2:4)=o2;
   z(r+4:5:p,5:6) = o3;
                                  z(r+4:5:p,7:2:9)=z(r+4:5:p,2:2:4);
   z(r+4:5:p,1)= o3;
                                  z(r+4:5:p,3)=z(r+4:5:p,8);
   r=r+p1;
  end
t=1; for i =1:ny
  m = 5*nx*i;
  i1=(2*i-1)*cy; i2=(i-1)*dy; i3=i*dy;
  y(t:5:m,2:2:4)=i1;
                              y(t:5:m,5:7) = i2;
  y(t:5:m,9:10)=y(t:5:m,5:6); y(t:5:m,8)=y(t:5:m,2);
  y(t:5:m,1)=y(t:5:m,5);
                          y(t:5:m,3) = i3;
  y(t+1:5:m,2:2:4) = i1;
                                    y(t+1:5:m,5:7)=i3;
  y(t+1:5:m,9:10)=y(t+1:5:m,5:6); y(t+1:5:m,8)=y(t+1:5:m,2);
  y(t+1:5:m,1)=y(t+1:5:m,5);
                                    y(t+1:5:m,3) = i2;
  y(t+2:5:m, 1:10) = y(t:5:m, 1:10);
  y(t+3:5:m,1:10)=y(t+1:5:m,1:10);
  y(t+4:5:m,4:2:8) = i1;
                                 y(t+4:5:m, 1:3)=i3;
  y(t+4:5:m,7)=y(t+4:5:m,4);
                                y(t+4:5:m,5) = i2;
  y(t+4:5:m,9)=y(t+4:5:m,5);
                                y(t+4:5:m,10)=y(t+4:5:m,5);
  %vertices iguais p/os tetraedros de encima
    for k = 1:nz-1
        s = k*5*nx*ny + (i-1)*5*nx +1;
        y(s:5:s+5*nx-1,1:10) = y(t:5:m,1:10);
        y(s+1:5:s+5*nx-1,1:10)= y(t+1:5:m,1:10);
        y(s+2:5:s+5*nx-1,1:10) = y(t+2:5:m,1:10);
        y(s+3:5:s+5*nx-1,1:10) = y(t+3:5:m,1:10);
        y(s+4:5:s+5*nx-1,1:10) = y(t+4:5:m,1:10);
    end
t = t + 5 * nx:
end %for i
% posicao goblal dos nos: M
if k1 + k5 == 2
  s1 = 2*ny +1; % numero de nos em y.
  s0 = ny+1;
```

```
end if k1+k5==1
   s1 = 2*ny;
   s0 = ny;
end if k1+k5==0
   s1 = 2*ny-1;
   s0 = ny-1;
end if k3 + k4 == 2
   s2 = 2*nx+1; % numero de nos em x.
   s3 = nx+1;
end if k3+k4==1
  s2 = 2*nx;
   s3 = nx:
end if k3+k4==0
   s2 = 2*nx-1;
   s3 =nx-1:
end
Nn=s1*s2 ; % numero de nos nos niveis externos .
Nnn= s0*s2 + ny*s3; % numero de nos nos niveis internos.
nn = (k2+k6+ nz-1)*Nn + nz*Nnn;% numero de nos internos
MM = Nn + Nnn; b1 =0; c1=k2; t=1; p1 = 5*nx*ny; ind=zeros(n,10);
for k =1:nz
   tr =5*nx*ny*(k-1); cc= 5*nx; p = 5*nx*(ny-1)+tr;
   % indicador dos tetra. que estao na fronteira inferior
      ind(1:5:p1,1:6)=2;
                            ind(2:5:p1,1:6)=2;
      ind(3:5:p1,10)=2;
                            ind(4:5:p1,10)=2;
      ind(5:5:p1,3:5:8)=2;
                            ind(5:5:p1,10)=2;
   % indicador dos tetra. que estao na fronteira superior
      ind(n-p1+1:5:n,10)=6;
                                 ind(n-p1+2:5:n,10)=6;
      ind(n-p1+3:5:n,1:6)=6;
                                 ind(n-p1+4:5:n,1:6)=6;
      ind(n-p1+5:5:n,1:4:5)=6;
                                 ind(n-p1+5:5:n,6)=6;
      % indicador dos tetra. que estao na fronteira frontal
      ind(1+tr:cc:p+5,1:3)=3;
                                    ind(1+tr:cc:p+5,7:8)=3;
      ind(1+tr:cc:p+5,10)=3;
                                    ind(2+tr:cc:p+5,5)=3;
      ind(3+tr:cc:p+5,5)=3;
      ind(4+tr:cc:p+5,1:3)=3;
                                    ind(4+tr:cc:p+5,7:8)=3;
      ind(4+tr:cc:p+5,10)=3 ;
      ind(5+tr:cc:p+5,3:5)=3;
      % indicador dos tetra. que estao na fronteira posterior
      dd = cc + tr;
      ind(dd-4:cc:p1*k,5)=4; ind(dd-3:cc:p1*k,1:3)=4;
```

```
ind(dd-3:cc:p1*k,7:8)=4;
                               ind(dd-3:cc:p1*k,10)=4;
   ind(dd-2:cc:p1*k,1:3)=4 ;
                                ind(dd-2:cc:p1*k,7:8)=4 ;
   ind(dd-2:cc:p1*k,10)=4;
                               ind(dd-1:cc:p1*k,5)=4;
   ind(dd:cc:p1*k,1:6:7)=4;
                               ind(dd:cc:p1*k,10)=4;
   % indicador dos tetra. e nos. que estao na fronteira lat esquerda.
   ind(1+tr:5:tr+cc,9:10)=1;
                                  ind(1+tr:5:tr+cc,5:7)=1;
   ind(1+tr:5:tr+cc,1)=1;
                                  ind(2+tr:5:tr+cc,3)=1;
   ind(3+tr:5:tr+cc,9:10)=1;
                                  ind(3+tr:5:tr+cc,5:7)=1;
   ind(3+tr:5:tr+cc,1)=1;
   ind(4+tr:5:tr+cc,3)=1;
                                  ind(5+tr:5:tr+cc,5)=1;
   ind(5+tr:5:tr+cc,9:10)=1;
  % indicador dos tetra. que estao na fronteira lat. direita
   ind(1+p:5:p+cc,3)=5;
                                  ind(2+p:5:p+cc,9:10)=5;
   ind(2+p:5:p+cc,5:7)=5;
                                  ind(2+p:5:p+cc,1)=5;
   ind(3+p:5:p+cc,3)=5;
   ind(4+p:5:p+cc,5:7)=5;
                                  ind(4+p:5:p+cc,9:10)=5;
   ind(4+p:5:p+cc,1)=5;
   ind(5+p:5:p+cc,1:3)=5;
          q1=0; q2=0;
a1= k1;
mm = max([k-2+k2 0])*Nn;
for i =1:ny
   d = k3;
   p1 = (s2*a1+ q1)*c1 + (k-1)*Nnn+ mm;
   p0= s2*a1 + q2 + (k-1)*MM + k2*Nn;
   for j =k3:2:2*nx-1
     r1= (j*a1 + q1*d)*a1*c1 +((k-1)*Nnn + mm)*a1*d;
     r0= (j*a1 + q2*d)*a1 + ((k-1)*MM+ k2*Nn)*a1*d;
     r2 = ((j+1)*a1 + q2)*a1 + ((k-1)*MM+ k2*Nn)*a1;
     pp = (j*a1 + q1*d)*a1 + (Nnn+ k2*Nn+(k-1)*MM)*a1*d;
     qq = (j+2 + (2*i-1+ k1)*s2) + (Nnn+ k2*Nn+(k-1)*MM);
     rr = (j+2+q2+s3+a1*s2) + (k-1)*MM+ k2*Nn;
     if j==k3 & k3==0
       M(t,1) = 0;
                       M(t,2) = 0; M(t,3) = 0;
       M(t,4) = p1+1*c1;
       M(t,7) = 0;
                       M(t,8) = 0;
                                     M(t, 10) = 0;
       M(t+3,1)=0;
                       M(t+3,2)=0;
                                      M(t+3,7)=0;
       M(t+1,5)=0;
     else
       M(t,1) = r1;
                               M(t,2) = p1+j*c1;
       M(t,3) = p1+(s2+j)*c1; M(t,4) = M(t,2)+1*c1;
```

```
M(t,8) = p0+ (j+k3)/2;
     M(t,7) = r0;
     M(t, 10) = pp;
                             M(t+1,5)=M(t,3);
   end
  M(t,5) = ((j+2)*a1 + q1)*a1*c1 + ((k-1)*Nnn + mm)*a1;
  M(t,6) = M(t,5)-a1*c1;
  M(t,9) = r2;
M(t+1,2)=M(t,4)+c1; M(t+1,1)=M(t+1,2)+s2*c1; M(t+1,3)=M(t,5);
                     M(t+1,6)=M(t,4)+s2*c1;
M(t+1,4)=M(t,4);
M(t+1,8) = p0 + (1+(j+k3)/2);
M(t+1,7) = rr;
M(t+1,9) = M(t+1,7)-1;
M(t+1, 10) = qq;
M(t+2,1)=(M(t+1,10)-2*s2)*a1;
M(t+2,2) = M(t+1,10) - s2;
M(t+2,3) = M(t+1,10);
M(t+2,4)=M(t+2,2)-1;
                        M(t+2,5)=M(t,10);
M(t+2,6) = M(t+2,1)-a1;
M(t+2,8)=M(t+1,8);
                       M(t+2,9) = M(t,9);
M(t+2,7)=M(t+2,9)+a1;
                        M(t+2,10) = M(t,5);
M(t+3,3)=M(t,10); M(t+3,5)=M(t+2,3); M(t+3,4)=M(t+2,4);
M(t+3,10)=M(t,3); M(t+3,8)=M(t,8); M(t+3,9)=M(t+1,9);
M(t+3,6)=M(t+3,5)-1;
M(t+3,1) = (M(t+3,6)-1)*d;
M(t+3,2) = (M(t+3,4)-1)*d;
M(t+3,7) = (M(t+3,9)-1)*d;
M(t+4,1)=M(t+3,5);
                     M(t+4,2)=M(t+3,9);
                                          M(t+4,3)=M(t+3,10);
M(t+4,4)=M(t+3,8); M(t+4,6)=M(t+3,4);
                                          M(t+4,7)=M(t+2,8);
                                          M(t+4,5)=M(t,10);
M(t+4,8)=M(t,4);
                     M(t+4,9)=M(t+2,9);
M(t+4, 10) = M(t, 5);
   if j==2*nx-2+k3 & k4==0
     M(t,5) = 0;
     M(t+1,1)=0; M(t+1,2)=0; M(t+1,3)=0;
     M(t+1,7)=0; M(t+1,8)=0; M(t+1,10)=0;
     M(t+2,1)=0; M(t+2,2)=0; M(t+2,3)=0;
     M(t+2,7)=0; M(t+2,8)=0; M(t+2,10)=0;
     M(t+3,5)=0;
     M(t+4,1)=0; M(t+4,10)=0; M(t+4,7)=0;
```

```
end
                       t=t+5;
                       d=1;
                 end % for j
                 q1 = (2*i-1+k1)*s2;
                 q2=(i-1+k1)*s2 + i*s3;
                 a1=1;
                 if i ==ny & k5==0
                           T = 5*(k*ny-1)*nx+1;
                           for r=1:nx
                                      M(T,3)=0;
                                                                                      M(T+1,5)=0; M(T+1,6)=0;
                                      M(T+1, 1)=0;
                                     M(T+1,7)=0;
                                                                                  M(T+1,9)=0; M(T+1,10)=0;
                                      M(T+2,3)=0;
                                     M(T+3,1)=0; M(T+3,5)=0; M(T+3,6)=0;
                                     M(T+3,7)=0; M(T+3,9)=0; M(T+3,10)=0;
                                     M(T+4,1)=0; M(T+4,2)=0; M(T+4,3)=0;
                                      T = T + 5;
                     end
             end
      end % for i
      b1=1; c1=1;
      if k ==nz & k6==0
                    T = 5*nx*ny*(nz-1)+1;
                    for r =1:nx*ny
                           M(T, 10) = 0;
                                                                            M(T+1, 10)=0;
                           M(T+2,1:6)=0;
                           M(T+3, 1:6)=0;
                           M(T+4,1)=0; M(T+4,5)=0; M(T+4,6)=0;
                           T = T+5;
                     end
      end
end % for k
y_{1=y}; y_{x}; x_{y}; ny_{18}; nx_{9}; nz_{3}; dx = b/nx; dy_{a}, dz_{10}; dz_{10
= c/nz;
-----Programa que calcula as submatrizes de Rigidez-----
clear all syms x y z b y1 y2 y3 y4;
  f(1) = 1-3*(x+y+z)+ 2*(x^2+y^2+z^2) + 4*(x*y+x*z+y*z);
  f(2) = 4 * x * (1 - x - y - z);
```

```
f(3) = x*(-1 + 2*x);
f(4) = 4 * x * y;
f(5) = y*(-1 + 2*y);
f(6) = 4*y*(1 - x - y - z);
f(7) = 4 * z * (1 - x - y - z);
f(8) = 4 * x * z;
f(9) = 4*v*z;
f(10) = z * (-1 + 2 * z);
yy = y1 + (y4-y1) * x + (y3-y1) * y + (y2-y1) * z;
u0 = (yy)*(b-yy);
v0 = 0:
w0 = 0; \% Uo = [u0 v0 w0]
Duo = jacobian(u0,[x ;y ;z]);
for i=1:10
  v = jacobian(f(i), [x;y;z]);
  w(1) = int(v(1), z, 0, 1-x-y);
  w(2) = int(v(2), z, 0, 1-x-y);
  w(3) = int(v(3), z, 0, 1-x-y);
  % integrais que compoem : (1,Dxphi)
  bb(i,1)=int( int(w(1),y,0,1-x),x,0,1);
  bb(i,2)=int( int(w(2),y,0,1-x),x,0,1);
  bb(i,3)=int( int(w(3),y,0,1-x),x,0,1);
  for j = 1:10
  w = int(f(i)*f(j),z,0,1-x-y);
  % integrais que compoem : (phii,phij)
  a(i,j)= int(int(w,y,0,1-x),x,0,1);
  u = jacobian(f(j), [x;y;z]);
  ww(1) = int(f(j)*v(1),z,0,1-x-y);
  ww(2) = int(f(j)*v(2),z,0,1-x-y);
  ww(3) = int(f(j)*v(3),z,0,1-x-y);
  % integrais que compoem : (phii,grad(phij))
 b1(i,j) = int(int(ww(1),y,0,1-x),x,0,1);
 b2(i,j) = int(int(ww(2),y,0,1-x),x,0,1);
 b3(i,j) = int(int(ww(3),y,0,1-x),x,0,1);
 w1 = int(v(1)*u(1),z,0,1-x-y);
 w^2 = int(v(2) * u(2), z, 0, 1 - x - y);
 w3 = int(v(3)*u(3),z,0,1-x-y);
 % integrais que compoem : (grad(phii),grad(phij))
  cxx(i,j) = int(int(w1,y,0,1-x),x,0,1);
  cyy(i,j) = int(int(w2,y,0,1-x),x,0,1);
  czz(i,j) = int(int(w3,y,0,1-x),x,0,1);
 p1 = int(v(1)*u(2) + v(2)*u(1),z,0,1-x-y);
```

```
p2 = int(v(1)*u(3)+v(3)*u(1),z,0,1-x-y);
   p3 = int(v(2)*u(3)+v(3)*u(2),z,0,1-x-y);
   cxy(i,j) = int(int(p1,y,0,1-x),x,0,1);
   cxz(i,j) = int(int(p2,y,0,1-x),x,0,1);
   cyz(i,j) = int(int(p3,y,0,1-x),x,0,1);
  end
    for j=1:3
      s(i,j) = int(v(j),z,0,1-x-y);
      d1(i,j)= int(int(s(i,j),y,0,1-x),x,0,1);
    end
      k = int(f(i), z, 0, 1-x-y);
      e(i) = int(int(k,y,0,1-x),x,0,1);
end a = double(a); b1 = double(b1); b2 = double(b2); b3 =
double(b3); cxx = double(cxx); cyy = double(cyy); czz =
double(czz); cxy = double(cxy); cxz = double(cxz); cyz =
double(cyz); d1 = double(d1); e = double(e); bb= double(bb);
-----Programa que calcula as integras na fronteira-----
clear all syms x y z;
 f(1) = 1-3*(x+y+z)+ 2*(x^2+y^2+z^2) + 4*(x*y+x*z+y*z);
 f(2) = 4 x (1 - x - y - z);
 f(3) = x*(-1 + 2*x);
 f(4) = 4 * x * y;
 f(5) = y*(-1 + 2*y);
 f(6) = 4*y*(1 - x - y - z);
 f(7) = 4 * z * (1 - x - y - z);
f(8) = 4 x z;
f(9) = 4*y*z;
f(10)=z*(-1+2*z);
k = input('ingresse o numero corresp. a fronteira desejada:'); for
i =1:10
   jacf(i,1:3)= jacobian(f(i), [x ;y ;z]);
end
% integrais de superficie na fronteira k
if k==3 | k==4 % frontal ou posterior
   v=0;
   for i =1:10
      fi = eval(f(i));
      for j = 1:10
        fj = eval(f(j));
```

```
fxi= eval(jacf(i,1));
        fyi= eval(jacf(i,2));
        fzi= eval(jacf(i,3));
        w1 = int(fxi*fj,z,0,1-x);
        isff1(i,j) = int(w1,x,0,1);
        w^{2} = int(fyi*fj,z,0,1-x);
        isff2(i,j) = int(w2,x,0,1);
        w3 = int(fzi*fj,z,0,1-x);
        isff3(i,j) = int(w3,x,0,1);
        w = int(fi*fj,z,0,1-x);
        ISFF(i,j) = int(w,x,0,1);
     end
   end
   isff1 =double(isff1); isff2 =double(isff2);
   isff3 =double(isff3); ISFF =double(ISFF);
 end
if k==1 | k==5 % Lat. esquerda ou direita
x=0:
   for i =1:10
      fi = eval(f(i));
      for j = 1:10
        fj = eval(f(j));
        fxi= eval(jacf(i,1));
        fyi= eval(jacf(i,2));
        fzi= eval(jacf(i,3));
        w1 = int(fxi*fj,z,0,1-y);
        isfl1(i,j) = int(w1,y,0,1);
        w2 = int(fyi*fj,z,0,1-y);
        isfl2(i,j) = int(w2,y,0,1);
        w3 = int(fzi*fj,z,0,1-y);
        isfl3(i,j) = int(w3,y,0,1);
        w = int(fi*fj,z,0,1-y);
        ISFL(i,j) = int(w,y,0,1);
     end
   end
  isfl1 =double(isfl1); isfl2 =double(isfl2);
  isfl3 =double(isfl3); ISFL =double(ISFL);
end
if k==2 | k==6 % frontal inferior ou superior
    z=0;
   for i =1:10
     fi = eval(f(i));
```

```
for j = 1:10
       fj = eval(f(j));
       fxi= eval(jacf(i,1));
       fyi= eval(jacf(i,2));
       fzi= eval(jacf(i,3));
       w1 = int(fxi*fj,y,0,1-x);
       isfi1(i,j) = int(w1,x,0,1);
       w2 = int(fyi*fj,y,0,1-x);
       isfi2(i,j) = int(w2,x,0,1);
       w3 = int(fzi*fj,y,0,1-x);
       isfi3(i,j) = int(w3,x,0,1);
       w = int(fi*fj,y,0,1-x);
       ISFI(i,j) = int(w,x,0,1);
    end
  end
  isfi1 =double(isfi1); isfi2 =double(isfi2);
 isfi3 =double(isfi3); ISFI =double(ISFI);
end
%Este programa resolve atraves de FEM, a equacao de Stokes (u,v,w,p)
% - coef*uxx+ px= f. em omega (analogamente para v e w)
\% ux + vy + wz = 0. em omega
% (u, v, w) | fronteira = (v1,v0(x),v3); v0(x) = Vox(2b-x)z(2c-z)/(bc)^2
clear all
tic;
% carregando a malha M e outros parametros
load malhaO2.mat M ind nn a b c n nx ny nz dx dy dz x y z ;
% a = 1.8 ; b = 0.9; c =0.15; dimensoes do dominio
% nx=18; ny=9; nz=3; % numero de div. do dominio
% Nn numero de de nos em cada nivel z.
% Nnn numero de de nos em cada nivel z do medio.
% nn = numero total de nos interiores.
% n = numero total de tetraedros
load matrigidez2.mat bb cxx cyy czz cxy cxz cyz;
% bb matriz (1 |grad(phii))
   A= sparse([],[],[],nn,nn,ceil(0.02*(nn<sup>2</sup>)));
   B1=zeros(nn,n); B2=zeros(nn,n); B3=zeros(nn,n);
d1 = zeros(nn,1); d2=d1; d3=d1; d4 = zeros(n,1);
```

```
% geracao de matrizes de rigidez e preenchimento das matrizes A e B Vo=0.35; v0=0.07; w0 = 0; for tr =1:n
```

```
J = zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
     for s=1:2
        J(s,1) = x(tr,2*s+1)-x(tr,1);
        J(s,2) = y(tr,2*s+1)-y(tr,1);
        J(s,3) = z(tr,2*s+1)-z(tr,1);
     end
    J(3,1)=x(tr,10)-x(tr,1); J(3,2)=y(tr,10)-y(tr,1); J(3,3)=z(tr,10)-z(tr,1);
    vol = det(J);
    J11=det(J(2:3,2:3));J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
    J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
    J_{13}=det(J(2:3,1:2)); J_{23}=det(J(1:2:3,1:2)); J_{33}=det(J(1:2,1:2));
    J1= [J11 J12 J13]; J2= [J21 J22 J23]; J3= [J31 J32 J33];
%* Matriz de coef. ( grad(phii) | grad(phij) ) = pij
ss = J1*J1'*cxx +J2*J2'*cyy + J3*J3'*czz; p= (ss - J1*J2'*cxy +
J1*J3'*cxz- J2*J3'*cyz)/vol;
% definicao da matriz dos coef. (1 |dxk(phii)):qk , k=1,2,3
    q1= bb*[J11 -J21 J31]';
    q2= bb*[-J12 J22 -J32]';
    q3= bb*[J13 -J23 J33]';
for i=1:10
   ig = M(tr,i);
    for j=1:10
       jg = M(tr, j); f = ind(tr, j);
        % preenchimento da matriz A(grad(phii)|grad(phij))
        A(ig, jg) = A(ig, jg) + p(i, j);
       if f ==3 & jg ~= ig
       %Calc. as vel. p/indices j na fronteira frontal
        u0(j) = Vo*z(tr, j)*(2*c-z(tr, j))/(c^2)
        u0(j)= Vo*x(tr,j)*(2*b- x(tr,j))*z(tr,j)*(2*c-z(tr,j))/(b*c)^2;
        d1(jg) = d1(jg) + u0(j)*p(i,j);
        d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
        d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
        A(ig, jg) = 0;
       end
         % para j na fronteira posterior
       if f==4 & jg ~= ig
        % u0(j) = 0;
         u0(j)= Vo*x(tr,j)*(2*b- x(tr,j))*z(tr,j)*(2*c-z(tr,j))/(b*c)^2;
         d1(jg)= d1(jg) + u0(j)*p(i,j);
         d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
```

```
d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
       A(ig, jg) = 0;
     end
    % para j na fronteira lat. direita
     if f==5 & jg ~= ig
       % u0(j)=Vo*y(tr,j)*(2*b- y(tr,j))*z(tr,j)*(2*c-z(tr,j))/(b*c)^2;
       u0(j) = Vo*z(tr,j)*(2*c-z(tr,j))/(c<sup>2</sup>);
       d1(jg)= d1(jg)+ u0(j)*p(i,j);
       d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
       d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
       A(ig, jg) = 0;
     end
      % para j na fronteira lat. esquerda
    if f==1 & jg ~= ig
      %u0(j)=Vo*y(tr,j)*(2*b- y(tr,j))*z(tr,j)*(2*c-z(tr,j))/(b*c)^2;
       u0(j) = 0;
       d1(jg)= d1(jg)+ u0(j)*p(i,j);
       d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
       d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
       A(ig, jg) = 0;
    end % if fronteira posterior.
       %para j na fronteira inferior
    if f==2 \& jg = ig
       d1(jg) = d1(jg) + 0;
       d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
       d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
       A(ig, jg) = 0;
    end
    %integral fronteira superior
    if f==6 & jg ~= ig
      % u0(j)= Vo*y(tr,j)*(2*b- y(tr,j))/b^2;
       u0(j)= Vo*x(tr,j)*(2*b- x(tr,j))/b^2;
       d1(jg) = d1(jg) + u0(j) * p(i, j);
       d2(jg) = d2(jg) + v0*p(i,j);
       d3(jg) = d3(jg) + w0*p(i,j);
       A(ig, jg) = 0;
    end
  end % for j
% preenchimento da matriz Bk =( psi |dxk(phii))
      B1(ig,tr) = B1(ig,tr) + q1(i);
      B2(ig,tr) = B2(ig,tr) + q2(i);
      B3(ig,tr) = B3(ig,tr) + q3(i);
```

```
end % for i
end %for tr
clear matrigidez2.mat malha02.mat [L,U] = lu(A);
clear A u0 % calculo de inv(AA)*BB
  iAB1 = L \setminus B1;
  iAB2= L B2;
  iAB3 = L B3;
  iAB1 = U \setminus iAB1;
  iAB2= U \setminus iAB2;
  iAB3= U\iAB3;
BB = B1'*iAB1 + B2'*iAB2 + B3'*iAB3; % B'*iAB*
clear iAB1 iAB2 iAB3 [LL,UU] = lu(BB);
clear BB % calculo de inv(AA)*d
iAf1 = L d1; iAf2 = L d2; iAf3 = L d3; iAf1 = U iAf1; iAf2 =
U \in 12; iAf3 = U \in 3;
pre = LL\(B1'*iAf1 + B2'*iAf2 + B3'*iAf3 -d4); % Solucao da pressao
clear iAf iAf1 iAf2 iAf3 d4 LL
pre = UU\pre;
Uo = L (B1*pre-d1);
Uo = U\Uo; Vo = L\(B2*pre-d2);
Vo = U \setminus Vo;
Wo = L \setminus (B3*pre-d3);
Wo = U \setminus Wo;
toc;
```

Referências Bibliográficas

- Brooks, A.N., e Hughes, T.J.R., Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incomprenssible Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol 32, 199-259. Elsevier, 1982.
- [2] Cantão, R.F., Modelagem e Simulação Numérica de Derrames de Óleo no Canal de São Sebastião, SP. Tese de Mestrado, IMECC-UNICAMP. Campinas/SP 1998.
- [3] Codina, R., Oñate, E. e Cervera, M., The intrinsic time for the Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulation using quadratic elements., Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol 94, 239-262. Elsevier, 1992.
- [4] Codina, R., Comparison of some finite element methods for solving the diffusionconvection-reaction equation., Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol 156,185-210. Elsevier, 1998.
- [5] Christie, I. et al., Finite Elements Methods for Second Order Differential Equations whit Significant First Derivates, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol 10, 1389-1396, 1976.
- [6] De Oliveira, F.R., O Comportamento Evolutivo de uma Mancha de óleo na Bahia de Ilha Grande, RJ: Modelagem, Análise Numérica e Simulações. Tese de Doutorado, IMECC-UNICAMP. Campinas/SP, 2003.
- [7] De Oliveira, G.R., De Oliveira, M.K., Remoção de contaminantes tóxicos dos efluentes líquidos oriundos da atividade de produção de petróleo no mar, Bol. téc. Petrobrás, R.J., 43(2)129-136, abr/jun. 2000.
- [8] Douglas, J. e Doupont, T., Galerkin Methods for Parabolic Equations, SIAM J. Numer. Anal., vol 7, No. 4 (1970), 1575-626.
- [9] Evans, L.C., Partial Differential Equations, Berkeley Mathematics Lecture Notes, vol. 3A, 1993.
- [10] Gomes, A.S., *et al.*, Causas e conseqüências do impacto ambiental da exploração dos recursos minerais marinhos., Brazilian Journal of geophysics, vol. 18(3), 2000.

- [11] Hughes, T.J.R, et al., A New Finite Element Formulation For Computation Fluid Dynamics: V. Circunventing the Babuska-Brezzi, Condition: Stable Petrov-Galerkin Formulation of the Stokes Problem Accomodating Equal-Order Interpolations., Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol 59, 85-99. Elsevier, 1986.
- [12] Kardestuncer, H. e D.H.Norrie., Finite Element Handbook. McGraw-Hill, N.York, 1987.
- [13] Kennicut, M.C et al., Geochemical Patterns in Sediments Near Offshore Production Platforms, Can. Journal Aquat. Science, vol 53, 2554-2566, 1996.
- [14] Lions, J.L., Equations Diffrentelles Operationelles et Problèmes aux Limites, Springer-Verlag Berlin. Gottingen. Heidelberg, 1961.
- [15] Luczynski, E., Os condicionantes para o abandono de plataformas offshore após o encerramento da produção, Tese de Doutorado, PIPGE-USP, SP, 2002.
- [16] Marchuk, G.I., Mathematical Models in Environmental Problems, Studies in Mathematics and its Applications, vol. 16 North-Holland, 1986.
- [17] Meyer, J.F.C.A., Modelagem e simulação sumérica do transporte térmico em meios compostos. Tese de Doutorado,IMECC-UNICAMP. Campinas, SP. 1988.
- [18] Murray, J.D., Mathematical Biology, Springer 1989.
- [19] Pereira, O.A. e Travalloni, A.M., Metodologia experimental de amostragem isocinética para efluentes. Bol. téc. Petrobrás, Rio de Janeiro, R.J., 43(1):62-68, jan./mar. 2000.
- [20] Okubo, A., Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models, Berlin Heidelberg New York: Springer, 1980.
- [21] Rye, H. et al., Sensitivity Analysis and Simulation of Dispersed Oil Concentrations in the North Sea with the PROVANN Model. Environment Modelling and Software, vol 13, 421-429. Elsevier, 1998.
- [22] S. Johnsen *et al.*, The environmental impact factor: A proposed tool for produced water reduction, management and regulation SPE-paper No. 61178. International Conference on Health, Safety and the environment in Oil and Gas Exploration and Production, Held in Stavanger Norway, june, 2000.
- [23] Strang, G. e Fix, G.J., An Analysis of the Finite Element Method, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1973.
- [24] Site da Petrobrás: www.petrobras.com.br.

- [25] Site do Ibama:www.celaf.ibama.gov.br. Análise dos Impactos Ambientais. Campo de Espadarte- Bacia de Campos.
- [26] Site do Sistema de Vigilância do Mar Sivamar:www.sivamar.org/pesquisa/polho1.htm.
- [27] Site da Petrobrás: www2.petrobras.com.br/minisite/sala-de-aula.
- [28] Site da Petrobrás: www2.petrobras.com.br/tecnologia/espanhol/aguasprofundas/aguas.stm
- [29] Site Environmental assessment Division: http://www.ead.anl.gov/index.cfm, A White Paper Describing Produced Water from Production of Crude Oil, Natural Gas, and Coal Bed Methane: www.ead.anl.gov/pub/dsp
- [30] Site da OLF the Norwegian Oil Industry Association:www.olf.no/miljo/miljorapporter, Emisions and discharges from the Norwegian Petroleum Industry 2003.
- [31] Washburn Libe. *et al.*, Dispersion of Produced Water in Coastal Environment and its Biologicals Implications, Continental Shelf Research 19, 57-78. Pergamon 1999.