

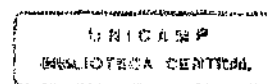
**POLUIÇÃO EM CORPOS AQUÁTICOS DE BAIXA CIRCULAÇÃO :
MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

Mateus Bernardes

Tese de mestrado sob orientação de : João Frederico C. A. Meyer

IMECC – UNICAMP

1998



POLUIÇÃO EM CORPOS AQUÁTICOS DE BAIXA CIRCULAÇÃO :
MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Este exemplar corresponde à redação
final da dissertação devidamente cor-
rigida e defendida por

Mateus Bernardes
e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 12 de março de 1998



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

Dissertação apresentada ao Instituto
de Matemática, Estatística e Compu-
tação Científica, UNICAMP, como
requisito parcial para obtenção do Tí-
tulo de MESTRE em *Matemática
Aplicada*.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**

Bernardes, Mateus

B456p Poluição em corpos aquáticos de baixa circulação: modelagem e
simulação numérica / Mateus Bernardes -- Campinas, [S.P. :s.n.],
1998.

Orientador : João Frederico C.A. Meyer

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

1. Modelos matemáticos. 2. Biomatemática. 3. Água - Poluição.
4. Análise matemática. I. Meyer, João Frederico Costa Azevedo. II.
Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática,
Estatística e Computação Científica. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 26 de fevereiro de 1998
pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



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



Prof (a). Dr (a). CLAUDIA MARIA JACOBI



Prof (a). Dr (a). RODNEY CARLOS BASSANEZI

Agradecimentos

Aos professores
Sueli Costa,
Klaus Floret,
Ítala D'Ottaviano,
José Luís Boldrini &
Wilson Ferreira Jr.

Aos colegas
Renatinha
Rosane
Tânia
Maurício &
Cantão

À banca,
Rodney Bassanezzi &
Cláudia Jacobi &
em especial ao meu orientador
João Frederico C. A. Meyer;

todos que, direta ou indiretamente,
contribuíram na elaboração desta tese.

SUMÁRIO

I

Esteros de Iberá	6
Poluição	8
Modelagem	10

II

A Coluna D'água	11
O Domínio	12
As Equações	12
O Que Dizem As Equações	13
Simplificações	14
As Primeiras Dificuldades	15
Formulação Variacional	16
Um Pouco Sobre Distribuições	17
Em Busca Do $\sqrt{\cdot}$ Adequado	18
Derivada de Distribuições	19
Espaços de Sobolev	20
Finalmente, O $\sqrt{\cdot}$ Adequado	20
Existência e Unicidade	21
Uma Segunda Aproximação	25
Método de Galerkin	26
Método dos Elementos Finitos	28
Crank-Nicolson	30

III

Poluentes que Bóiam	32
O Domínio	33
As Equações	33
O Que Dizem As Equações	34
Simplificações	34
Formulação Variacional	35
Distribuições Sobre Ω	36
Em Busca Do $\sqrt{}$ Adequado	37
Derivadas Parciais de Distribuições	37
Espaços de Sobolev	38
Finalmente, o $\sqrt{}$ Adequado	38
Existência e Unicidade	39
Método de Galerkin	42
Método dos Elementos Finitos	44

IV

Ensaio Computacionais	46
-----------------------	----

V

Considerações Finais	62
----------------------	----

VI

Referências	66
-------------	----

Esteros de Iberá

Esteros de Iberá é o nome de uma região pantanosa com mais de 14.000 km² situada na Província de Corrientes, nordeste da Argentina, entre os rios Paraná e Uruguai. Iberá é um nome guarani que significa “águas brilhantes”, e é exatamente a água que caracteriza o local, rico em lagoas, ilhas, pântanos e riachos. Por ser uma área de difícil acesso, a biodiversidade tem permanecido quase intacta, principalmente depois da criação da Reserva Natural de Iberá pelo governo provincial na década de 80. Nesta região ainda ocorrem algumas espécies ameaçadas de extinção, segundo a União Internacional para a Conservação da Natureza, tais como o lobo guará (*Chrysocyon brachyurus*), o cervo dos pântanos (*Blastocerus dichotomus*), a lontra (*Lutra longicaudis*) e o jacaré (*Caiman latirostris*). Estas características tornam a região exemplar único no mundo, semelhante ao Pantanal Matogrossense, que além de muito maior, tem sido muito mais agredido (cf. [1]).

Apesar dos esforços da *Fundación Iberá*, criada em 1988, a região vem sendo ameaçada pela crescente atividade agro-industrial na região (muitos dos proprietários são plantadores de arroz e outros grãos) e nas vizinhanças. Estas atividades têm sido responsáveis pelo lançamento irresponsável de agroquímicos na região, drenagem subterrânea para as plantações e outras barbaridades (cf. [1] e [10]). Além disso, o projeto da Hidrovia Paraguai-Paraná, financiada pelo Banco Interamericano de Desenvolvimento, apesar de ainda não ter muito claro o trajeto, assusta pois pode modificar um ecossistema que é extremamente frágil. O projeto de alargamento e modificação do curso dos rios Paraguai e Paraná com objetivos de transporte de mercadorias já está iniciado na região do Pantanal, ameaçando o ecossistema e a vida das comunidades ribeirinhas, devendo na sua fase final afetar seriamente os Esteros de Iberá (cf. [27]).

Estes fatores interessaram a comunidade internacional, e foi criado o *Esteros del Iberá, the sustainable management of wetland resources*, um projeto cujo objetivo geral

é a criação de instrumentos e métodos necessários para a conservação futura e o desenvolvimento auto-sustentado da região. A idéia é criar uma equipe com especialistas nas mais diversas áreas do conhecimento para que desta abordagem interdisciplinar possam sair soluções que sejam social, econômica e ambientalmente aceitáveis. Os pesquisadores deste projeto estão ligados a diferentes instituições, como : *Unicamp* e *UFRJ* (Brasil); *Universidad del Centro* e *Universidad del Salvador* (Argentina); *University of York* (EUA); *Universidad de Siena* (Itália); *Universidad de Aveiro* (Portugal); e *Universidad de Cádiz* (Espanha).

Os grupos de trabalho devem ser divididos, no estágio inicial, segundo sua especialidade, para num segundo integrarem-se as partes e formar um todo. O grupo de Biomatemática do IMECC-UNICAMP participa do projeto através do estudo de poluição agroquímica em corpos de baixa circulação, utilizando modelos evolutivo-difusivo-advectivos de equações diferenciais parciais. E aqui já se nota a importância da interdisciplinaridade do projeto, pois estaremos dependendo de dados químicos, físicos e biológicos sobre as lagoas, além das características sócio-econômicas que determinam que tipo de poluente devemos estudar. *Luna, Galarza, Fernández e Iberá* são as quatro maiores lagoas do sistema com superfície variando entre 14,6 e 79,4 km². A alimentação no sistema todo é devida basicamente a aportes pluviais. Pelo fato de estarem totalmente imersas no pântano (com exceção da Lagoa Iberá que tem um pequeno trecho numa região arenosa) estes ambientes são de baixa circulação, já que os Esteros atuam retardando o escoamento superficial, armazenado água e funcionando como superfície evapotranspirante (cf. [11]). Os principais canais de drenagem do sistema são o rio *Corrientes*, que pouco afeta estas lagoas; e a sudeste, o objeto de estudo deste trabalho, a drenagem da lagoa Iberá pelo rio *Miriñay*, através dos *Esteros del Miriñay*.

Utilizaremos as lagoas do sistema com diferentes características para fazer um estudo de caso sobre duas situações diferentes. Nosso interesse no projeto justifica-se devido à similaridade com o Pantanal Matogrossense. Por ser de extensão bem inferior, os Esteros de Iberá podem ser considerados como um bom campo de testes para aproveitamento em futuros projetos relativos ao Pantanal. Além disso, a construção de uma hidrovia que atravessa ambas as regiões unifica as preocupações com o meio-ambiente e com o desenvolvimento auto-sustentado das populações locais. Temos ainda

que frisar a importância do envolvimento da comunidade internacional num projeto deste porte, proporcionando condições para o desenvolvimento de um trabalho conciso.

Poluição

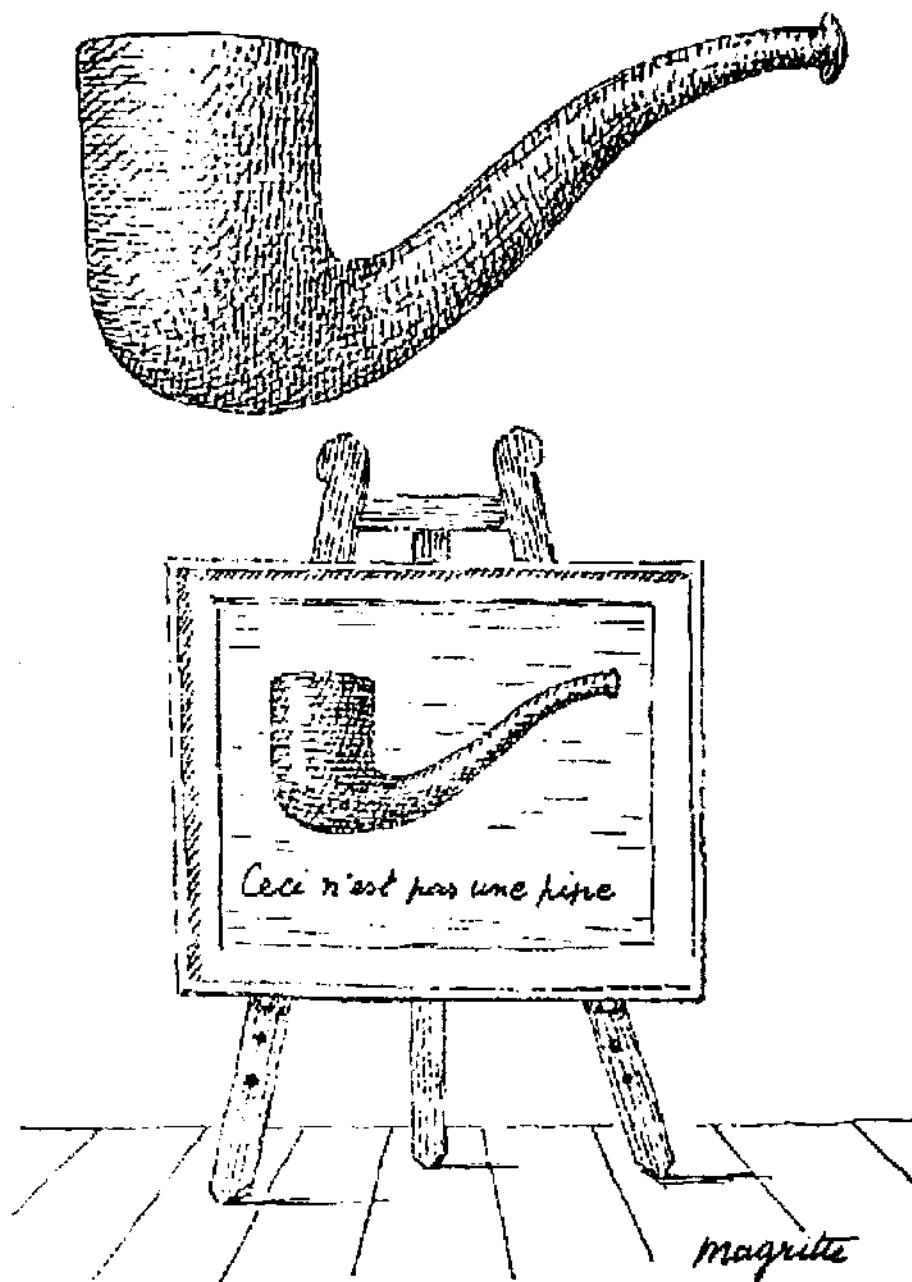
Diversos fatores podem contribuir para poluir corpos aquáticos. A ocupação humana é um exemplo de algo que não se aplica aos *Esteros de Iberá* pois a região é de baixa densidade populacional, mas que no Pantanal pode ser mais influente. A presença das culturas de soja e arroz é, neste caso, a maior fonte de poluição. O uso de pesticidas organoclorados ou organofosforados e defensivos fenólicos, que são poluentes de superfície; repelentes para aves, que podem ser substâncias fenólicas ou aromáticas ou ainda a queima de combustíveis e solventes a base de petróleo (piche, óleo diesel, querosene, gasolina, benzina, ...), todos poluentes de superfície; e ainda poluentes à base de alumínio e cobre, com especial atenção aos hidróxidos, Al(OH)_3 e Cu(OH)_2 , que floculam em condições de saturação na água; são exemplos da agressão que a atividade agroindustrial pode causar (cf. [13]).

Modelagem

Modelos matemáticos para dispersão de poluentes estão bastante difundidos hoje, pelo menos nas áreas ambiental e de matemática aplicada. Ainda assim, fora destes meios, este tipo de abordagem pode causar surpresa. A descrição matemática deste tipo de fenômeno é aproximada, assim como é aproximada a descrição de um cavalo por uma pintura, ou fotografia. Qualquer linguagem corrompe o objeto descrito, moldando-o, segundo suas próprias limitações. René Magritte pintou num quadro um cachimbo e escreveu “isto não é um cachimbo”. Afinal, não se pode fumar no desenho de um cachimbo (cf. [12]) !

Neste sentido, o conjunto de equações, solução numérica e ensaios computacionais aqui apresentados não são uma descrição fiel do fenômeno natural que ocorre em Iberá, estando sujeito às limitações da linguagem matemática. E estas limitações não serão poucas, tanto que, mesmo dentro da linguagem matemática, a

solução será aproximada. Devemos aproveitá-la do ponto de vista qualitativo e nunca do ponto de vista quantitativo. Fora isso, estes modelos permitem simulações de situações futuras ou passadas, que são indicativos do que pode acontecer ou ter acontecido na realidade. E isso justifica o trabalho de modelagem como instrumento de compreensão da realidade, aceitando-a, se plausível, ou, modificando-a, se necessário.



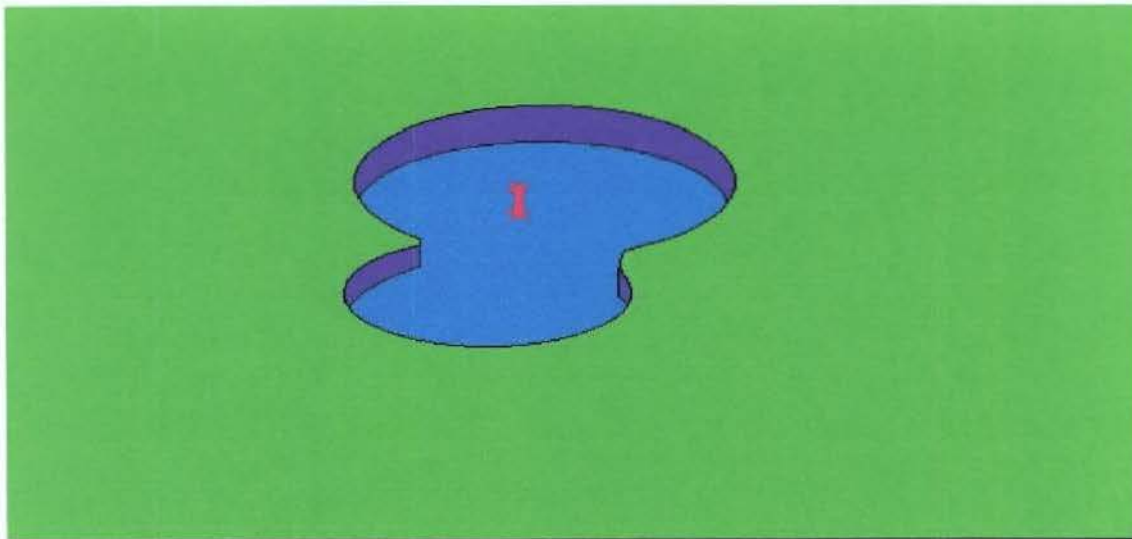
“ Palavras não são más
Palavras não são quentes
Palavras são iguais
Sendo diferentes
Palavras não são frias
Palavras não são boas
Os números pros dias
E os nomes pras pessoas “

(Sérgio Britto & Marcelo Fromer, “Palavras”)

II

A Coluna d'Água

Do ponto de vista matemático, os casos *unidimensionais* são os mais simples de serem tratados. E apesar disso, muitos casos são de grande utilidade. A questão é quando podem ser usados. Imagine uma lagoa isolada, de profundidade quase constante, sem correntezas. Este é o caso das lagoas Luna e Galarza do sistema Iberá. Portanto uma coluna d'água, esteja ela bem no meio da lagoa ou próxima à margem, apresenta características bastante semelhantes. Pois este “bastante semelhantes” na linguagem matemática será “igual” e diremos que, por *simetria*, o que acontece na nossa coluna d'água *padrão* é o que acontece, aproximadamente, em cada coluna d'água da lagoa.



Coluna d'água em vermelho sobre lago matemático

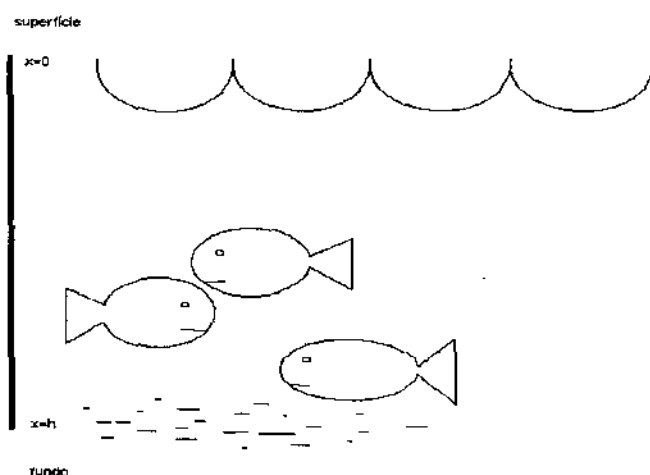
O que queremos é obter uma equação ou conjunto de equações que estabeleça a concentração C do poluente na altura x , no instante t . Percebe-se portanto que a concentração do poluente é *função* de duas variáveis, $C(x,t)$ ¹. Isso não impede que

¹ Em alguns casos temos os assim chamados fenômenos *estacionários*, que no nosso caso seria a concentração do poluente não variasse com o passar do tempo, $C(x)$.

chamemos este modelo de unidimensional, e o faremos, como se suprimíssemos, para este efeito, a dimensão temporal.

O Domínio

Para estabelecermos um modelo matemático já estamos equipados de um *domínio espacial* : a coluna d'água, que na nossa linguagem é um intervalo da reta real, I , que começa na superfície, em 0 , e termina na profundidade média, h , da lagoa em questão. Dois pontos do nosso domínio são especiais (e isto fica mais claro adiante), o 0 e o h ; eles são a *fronteira* do nosso domínio espacial. O domínio temporal também é um intervalo da reta real, J , que começa em 0 (o instante em que começamos a estudar o fenómeno) e terminar num valor arbitrário τ , que depende somente do interesse na observação do fenómeno².



As Equações

O passo seguinte é descrição do fenómeno sobre a região por intermédio de uma *equação diferencial parcial (EDP) e condições iniciais e de fronteira (ou contorno)*.

² Nada impede que se estabeleça um domínio temporal que comece em $-t$, por exemplo. Isso permitiria especular sobre a concentração do poluente antes de iniciada a observação do fenómeno.

Esta equação descreve a variação da concentração do poluente em cada ponto do interior da coluna enquanto passa o tempo, mediante a presença de certos fenômenos, sujeito às condições impostas sobre a superfície e o fundo da coluna, e a partir de uma configuração inicial de concentração do poluente.

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(\alpha \nabla C) - \text{div}(V.C) - \sigma C + f, & \text{em } (0,h) \times (0,\tau] \\ C(0,t) = 0, & \text{para todo } t \in (0,\tau] \\ C(h,t) = 0, & \text{para todo } t \in (0,\tau] \\ C(x,0) = C_0(x), & \text{para todo } x \in (0,h] \end{cases}$$

É bom que se diga que há um certo abuso no uso do gradiente e divergente da concentração C , pois consideramos estes operadores somente sobre sua dimensão espacial, x .

O Que Dizem as Equações

O conjunto de equações (1) é um exemplo da descrição de um fenômeno de evolução difusivo-advectivo numa coluna d'água. Esta equação é válida para cada altura x na coluna e cada instante t .

A dinâmica difusiva, dada por $-\text{div}(\alpha \nabla C)$, é resultado de movimentos aleatórios microscópicos, obedecendo a *Lei de Fick*. A difusão é o espalhamento natural do poluente em contato com a água. O movimento advectivo, descrito por $\text{div}(V.C)$, é resultado da movimentação do próprio meio, independentemente assim da “vontade” dos “indivíduos” nele imersos. O termo de decaimento diz como se comporta a perda de massa no sistema, e nós assumimos que esta perda é proporcional à própria concentração por σ . No caso de poluentes esta perda de massa pode se configurar como uma porcentagem do poluente que, em contato com outros elementos químicos, dá origem à novas substâncias.

A segunda e terceira linha indicam as condições de fronteira, isto é, o poluente não bóia, $C(0,t)=0$, e o fundo da coluna é distante o suficiente para que não chegue lá o

poluente, $C(h,t)=0$. Estas duas condições são válidas para todo o instante t , com exceção de $t=0$, onde temos uma configuração inicial do poluente distribuído pela coluna dada por $C_0(x)$.

Simplificações

Dependendo das condições físicas específicas de cada problema podemos determinar os coeficientes α , V e σ . O coeficiente de difusibilidade da substância no meio, α , pode depender do tempo, da posição e até mesmo da concentração do poluente. Aqui, estaremos considerando um intervalo de tempo grande o suficiente para que possamos trabalhar com um valor médio para α , que independa destes fatores, sendo, pois, constante e ficando determinado somente pelo poluente e pela água em que se difunde. V é a velocidade limite (ou de Stokes) que é devida à ação da gravidade, e será considerada constante.

Com estas simplificações a EDP em (1) pode ser reescrita e teremos um novo conjunto de equações :

$$(2) \quad \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \sigma C + f, & \text{em } (0,h) \times (0,\tau] \\ C(0,t) = 0, & \text{para todo } t \in (0,\tau] \\ C(h,t) = 0, & \text{para todo } t \in (0,\tau] \\ C(x,0) = C_0(x), & \text{para todo } x \in (0,h] \end{cases}$$

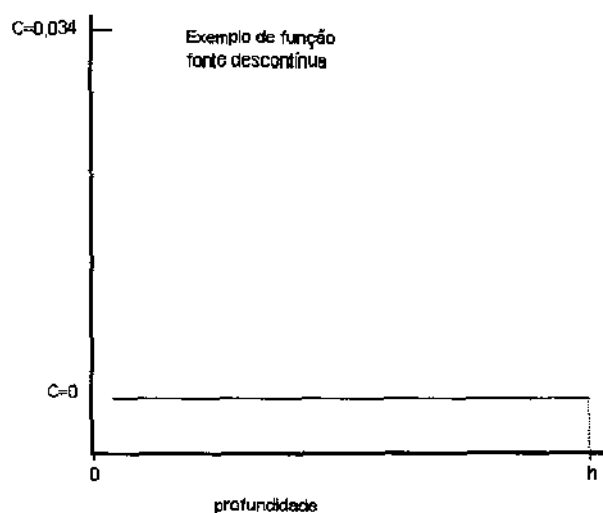
A descrição do fenômeno difusivo-advectivo por (2) já foi feita antes e pode ser encontrada também, com pequenas variações nas condições de fronteira e/ou iniciais em Marchuk [19], Mistro [22] e Palomino [25]³. Mas este é só o primeiro passo da nossa caminhada, temos apenas uma descrição da variação temporal da concentração do poluente na coluna d'água e o que queremos saber é a concentração do poluente em cada altura da coluna num instante qualquer, isto é, a solução $C(x,t)$ de (2). Optamos por encontrar a *solução fraca*⁴ desta equação, um dentre tantos métodos para resolvê-la. Para chegar lá, precisaremos trabalhar um pouco dentro da linguagem matemática.

³ Também deve-se salientar que se tratam de estudos de outros casos.

⁴ Mais adiante fica claro, espera-se, o que vem a ser *solução fraca*

As Primeiras Dificuldades

Algumas considerações devem ser feitas ainda sobre a natureza das parcelas que aparecem na nossa *EDP*. O operador $\text{div}(\alpha \nabla \cdot)$ sobre C força que a concentração de poluente esperada – a solução ! – tenha segunda derivada contínua em todos os pontos do domínio espaço-temporal, isto é, seja de classe $C^2(I)$, forçando também que a função *fonte* seja *contínua*. Isso restringe um pouco nossa abordagem. Imaginemos que a fonte de poluente sobre a nossa coluna seja uma garoa ácida, que deposita suavemente na superfície da coluna uma certa quantidade de poluente. Esta fonte age somente sobre um ponto na coluna, valendo zero em todo o resto da coluna. Além disso, a garoa pode cessar num determinado instante, provocando também uma descontinuidade na dimensão temporal da concentração.



Em vez de recorrermos aos meios clássicos de evitar esta dificuldade, como por exemplo, aproximar a fonte por uma função contínua, mudaremos o universo matemático de maneira a poder trabalhar com a fonte da forma como ela está.

Formulação Variacional

A próxima etapa é passar da descrição do problema (2), chamada *formulação clássica* para uma outra, dita *formulação fraca* ou *variacional*. Esta nova descrição nos permite trabalhar com fontes descontínuas, além de exigir menos *regularidade*⁵ da solução, o que torna a tarefa de encontrá-la um pouco mais fácil, pois estaremos procurando a solução num espaço mais amplo que $C^2(I)$, com a vantagem de que as funções de $C^2(I)$ também pertencem a este espaço.

Vamos considerar uma função $v:I \rightarrow \mathbb{R}$ chamada *função teste*. Por enquanto não diremos muita coisa sobre ela, exceto que ela vale zero na fronteira de I , $v(0) = v(h) = 0$. Chamaremos o espaço das funções que se anulam na fronteira de I de $\mathcal{V}$.

Multiplicando a EDP em (2) por $v \in \mathcal{V}$, obtém-se :

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cdot v = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot v - V \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v - \sigma C \cdot v + f \cdot v$$

Tomando a integral de *Lebesgue*⁶ em I dos membros da equação acima :

$$\int_I \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v dx - \alpha \int_I \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot v dx + V \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v dx + \sigma \int_I C \cdot v dx = \int_I f \cdot v dx$$

O que já cria uma nova exigência para a função teste v : que ela seja integrável. Note-se que, como a função teste é arbitrária, a igualdade acima é validade para qualquer função v em $\mathcal{V}$. Podemos ainda, integrando por partes, substituir a segunda integral acima:

$$- \alpha \int_I \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot v dx = -C \cdot v \Big|_h^0 + \alpha \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dv}{dx} dx$$

⁵ Quanto maior a ordem das derivadas de uma função, mais regular ela é.

⁶ A integral de *Lebesgue* é mais geral que a de *Riemann*, com a vantagem de que, se uma função é Riemann integrável então ela é Lebesgue integrável e as integrais coincidem. As integrais que aparecem neste texto são as de Lebesgue a menos de menção em contrário.

Onde se percebe a importância de que v se anule na fronteira de I , obtendo :

$$(3) \quad \int_I \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v dx + \alpha \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dv}{dx} dx + V \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v dx + \sigma \int_I C \cdot v dx = \int_I f \cdot v dx, \text{ para toda } v \in \mathcal{V}$$

Esta equação já pode quase ser chamada *formulação fraca* de (2), faltando esclarecer que espaço de funções é este $\mathcal{V}$. Perceba-se ainda que no uso da derivação por partes surge mais uma exigência sobre v , que tenha derivada primeira contínua. Esta exigência tanto sobre v quanto sobre C ainda é indesejável, pois queremos aumentar a quantidade de funções que podem ser soluções e funções teste !

Um pouco sobre Distribuições

Realizamos isto abrindo mão da concepção clássica de derivada, introduzindo a *derivada fraca* ou *derivada no sentido das distribuições*. Temos, pois, que definir novos objetos dentro da nossa linguagem.

Podemos equipar o espaço das funções que têm derivadas contínuas de todas as ordens em I , $C_0^\infty(I)$ com uma noção de *convergência* que não é a usual. Neste espaço diremos que uma *seqüência* $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ *converge* para 0 quando :

- (i) as funções φ_n têm *suporte*⁷ contido em um *compacto*⁸ $K \subset I$.
- (ii) além da seqüência $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, também as seqüências das suas derivadas de todas as ordens *convergem uniformemente* para 0.

Mudaremos o nome de $C_0^\infty(I)$ com esta noção de convergência para $\mathcal{D}(I)$. Define-se uma *distribuição* como uma *forma linear* contínua em $\mathcal{D}(I)$, portanto uma distribuição é um elemento do *dual* deste espaço, $\mathcal{D}'(I)$, que é o *espaço vetorial* de todas as aplicações lineares de $\mathcal{D}(I)$ em $\mathbb{R}$.

⁷ Imagine o conjunto dos pontos onde uma função é diferente de zero. O *suporte* desta função é o *fecho* deste conjunto. A grosso modo, o *fecho* serve para agregar a conjuntos abertos, a sua fronteira, tornando-os fechados.

⁸ Subconjuntos da reta são *compactos* se são fechados e limitados.

Assim, se T é uma distribuição e $\varphi \in \mathcal{D}(I)$, denotamos o valor de T em φ por $T(\varphi)$, ou ainda, $\langle T, \varphi \rangle$. Precisamos ainda dizer como é que as distribuições convergem. Se $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é uma seqüência de distribuições, ela converge para a distribuição T , se $\forall \varphi \in \mathcal{D}(I)$ a seqüência numérica $(\langle T_n, \varphi \rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ converge para o número $\langle T, \varphi \rangle$.

Nosso objetivo não é, neste texto, refazer a teoria das distribuições. Aqui muitos resultados serão apresentados sem prova, visto que elas estão bem feitas em textos clássicos. O interessado pode procurar Medeiros [20] para uma primeira abordagem, inclusive com aplicações desta teoria às equações diferenciais parciais.

Ainda não sabemos qual é o espaço $\mathcal{V}$ da nossa formulação variacional. Vamos atrás dele !

Em Busca do $\mathcal{V}$ Adequado

O espaço vetorial das funções $u: I \rightarrow \mathbb{R}$ cuja restrição a cada subconjunto compacto K de I é *integrável*⁹, chama-se $L^1_{loc}(I)$. Este espaço tem uma característica muito interessante, podemos associar a cada elemento u dele uma distribuição. Por exemplo, fazendo :

$$\langle T, \varphi \rangle := \int_K u(x) \varphi(x) dx, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(I)$$

Medeiros [20] mostra que isto é de fato uma distribuição e que ela é univocamente definida por $u \in L^1_{loc}(I)$. Mostra também que existem distribuições que não podem ser definidos por qualquer função de $L^1_{loc}(I)$. Assim, via esta identificação e exceção podemos dizer que $L^1_{loc}(I) \subset \mathcal{D}'(I)$.

⁹ Mais uma vez : integrável no sentido de *Lebesgue*.

Derivada de Distribuições

Com base na idéia de integração por partes, *Sobolev* introduziu o conceito de *derivada fraca* de funções $u \in L^1_{loc}(a,b)$, como sendo a única função $h \in L^1_{loc}(a,b)$ tal que :

$$\int_a^b u \varphi' dx = - \int_a^b h \varphi dx, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(a,b)$$

A generalização desta idéia para uma distribuição T qualquer é devida a Schwarz. Sua derivada fraca é denotada por dT/dx e é a única distribuição tal que :

$$\langle \frac{dT}{dx}, \varphi \rangle = - \langle T, \frac{d\varphi}{dx} \rangle, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(a,b)$$

Perceba-se que para definir a derivada fraca de uma distribuição, dependemos da existência da derivada clássica de funções infinitamente diferenciáveis, φ . Portanto as distribuições possuem derivadas fracas de todas as ordens :

$$\langle \frac{d^n T}{dx^n}, \varphi \rangle = (-1)^n \langle T, \frac{d^n \varphi}{dx^n} \rangle, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(a,b)$$

Estamos quase chegando no ponto onde queremos. Já sabemos que as distribuições têm derivadas de todas as ordens, e que, a cada função de $L^1_{loc}(I)$ podemos associar uma distribuição. Na verdade, as funções que são só integráveis não nos interessam muito, mas aquelas cujo quadrado é integrável, pertencentes a $L^2(I)$. Por sorte, $L^2(I) \subset L^1(I)$, de tal modo que também as funções *quadrado integráveis* podem ser identificadas a distribuições, e as distribuições têm derivadas de todas as ordens. Um único problema ainda nos incomoda: nem toda função do L^2 tem derivada fraca no L^2 . Um exemplo pode ser encontrado em Medeiros [20].

Espaços de Sobolev

Contornaremos isso, tomando dentre as distribuições de L^2 aquelas cujas derivadas também são distribuições de L^2 . Este espaço¹⁰ foi idealizado por Sobolev, por isso leva seu nome. É denotado por $H^1(I)$.

Definiremos a seguir um *produto interno* e uma *norma*, respectivamente, neste espaço :

$$(u, v) = \int_I \frac{du}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \int_I u \cdot v dx$$

$$\|v\|^2 = \int_I \left| \frac{dv}{dx} \right|^2 dx + \int_I |v|^2 dx$$

Equipado com esta norma, $H^1(I)$ é um espaço de *Hilbert* real¹¹ (para uma demonstração, ver Medeiros [20]).

Finalmente, o $\sqrt{\quad}$ adequado

Ainda não é $H^1(I)$ o espaço que estamos procurando. Lembremos que na formulação variacional precisamos de funções que se anulem na fronteira de I . Escreve-se $H_0^1(I)$ o fecho de $\mathcal{D}(I)$ em $H^1(I)$. Como as funções de $\mathcal{D}(I)$ se anulam na fronteira de I , os elementos de $H_0^1(I)$ se anulam na fronteira de I *quase sempre*¹².

Isto já é suficiente para nós. Vejamos a seqüência de inclusões¹³ abaixo :

$$\mathcal{D}(I) \subset H_0^1(I) \subset L^2(I) \subset H^1(I) \subset \mathcal{D}'(I)$$

¹⁰ Na verdade, este tipo de espaço. Existem outros espaços de Sobolev.

¹¹ Um espaço de *Hilbert*, é um espaço que tem uma norma proveniente de um produto interno e que é *completo*.

¹² Significa dizer que se anulam a menos de um *conjunto de medida nula*, veja Lima [].

¹³ $H^1(I)$ é o dual de $H_0^1(I)$. $L^2(I)$ é o dual de si mesmo.

Podemos perceber que se tomarmos $\sqrt{\cdot} = H_0^1(I)$, os elementos de $\sqrt{\cdot}$ serão distribuições (portanto com derivada fraca de todas as ordens) que se anulam na fronteira de I . Escrevemos então a formulação fraca:

$$(4) \quad \int_I \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v dx + \alpha \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dv}{dx} dx + V \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v dx + \sigma \int_I C \cdot v dx = \int_I f \cdot v dx, \text{ para toda } v \in H_0^1(I)$$

Agora que temos o problema expresso dentro da linguagem conveniente, precisamos achar uma solução dentro desta linguagem. Em matemática, uma das questões mais importantes é saber se um determinado problema tem solução e se ela é única. É claro que o nosso problema de poluição tem uma solução: se um poluente cai sobre uma lagoa, sujeito às suas condições naturais, alguma configuração da concentração deste poluente devemos ter sobre a nossa lagoa ! Acontece que (4) é uma descrição matemática do problema e queremos verificar a existência e unicidade da solução do problema descrito nesta linguagem.

Existência e Unicidade

Para a prova de existência e unicidade de solução matemática, rescreveremos a equação (4) como :

$$(5) \quad \left(\frac{\partial C}{\partial t}, v \right) + A(t; C, v) = L_f(v), \text{ para todo } v \in H_0^1(I)$$

Onde :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}, v \right) := \int_I \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v dx$$

$$A(t; C, v) := \alpha \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dv}{dx} dx + V \int_I \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v dx + \sigma \int_I C \cdot v dx$$

$$L_f(v) := \int_I f \cdot v dx$$

Para que nossa descrição fique mais precisa é necessário que se especifique melhor o espaço funcional a que pertence a solução $C(x,t)$. Queremos que, $\forall t \in (0, \tau]$, a função $t \rightarrow C(\cdot, t)$ pertença a $H_0^1(I)$ e que sua derivada parcial com relação ao tempo seja integrável. Definimos para este fim o espaço $\mathfrak{F}$ abaixo:

$$\mathfrak{F} = \left\{ C \in L^2((0, \tau), H_0^1(I)) : \forall t \in (0, \tau], \frac{\partial C}{\partial t} \in L^2(I) \right\}$$

Colocado desta maneira, a solução $C \in \mathfrak{F}$ do problema (5) existe e é única se V é um espaço de Hilbert e se :

- (i) $\forall C \in \mathfrak{F}, \forall v \in V$, a função $t \rightarrow A(t; C, v)$ é mensurável;
- (ii) $|A(t; C, v)| \leq M \|C\|_{H^1(I)} \|v\|_{H^1(I)}$, com M uma constante positiva;
- (iii) $\exists \lambda > 0$ tal que
 $A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(I)}^2 \geq \delta \|v\|_{H^1(I)}^2$, com $\delta > 0$ e $v \in V$;
- (iv) $L_f(v)$ é contínuo ; e
- (v) $f \in L^2(I \times J)$ e $C_0 \in H_0^1(I)$.

Este teorema é devido a Lions [17]. Na maioria dos problema formulados fracamente a prova de existência e unicidade é feita usando o *Lema de Lax-Milgram*¹⁴. Acontece que neste caso falharia a coercividade da forma A por causa do termo advectivo. Além disso, no caso mais simples, o *Lema de Lax-Milgram* exige também *simetria* da forma A , no que falha (5) devido aos termos de variação temporal e advectivo.

Voltando à questão de existência e unicidade, lembramos que introduzimos o espaço L^2 justamente por causa da fonte, f , que descrevemos como quadrado integrável. A condição inicial, C_0 , está diretamente atrelada à presença de uma fonte, sendo da mesma "natureza" ($L^2(I)$). Além do mais, estará sujeita às condições de fronteira da lagoa, portanto será $H_0^1(I)$. Isto mostra que a fonte e a condição inicial satisfazem (v).

¹⁴ Se H é um espaço de Hilbert, $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ uma forma bilinear, limitada e coerciva e $b: H \rightarrow \mathbb{R}$ uma forma linear contínua, então existe um único $u \in H$ tal que $a(u, v) = b(v)$ para todo $v \in H$.

A mensurabilidade de $t \rightarrow A(t; C, v)$ justifica-se pelo fato de que a forma A é definida, para cada t , pela integral de funções integráveis, portanto, $t \rightarrow A(t; C, v)$ é mensurável por definição¹⁵.

Para mostrar que (5) satisfaz também às outras hipóteses do teorema não podemos, como acima, argumentar em cima do significado natural dos objetos na linguagem do problema original. A demonstração será feita argumentando dentro da linguagem matemática destes objetos e do teorema, a matemática.

A continuidade de $A(t; C, v)$ será mostrada tendo como base a *desigualdade de Hölder*¹⁶ em H^1 e em L^2 . Esta desigualdade relaciona o produto interno e a norma de objetos destes espaços.

Tomando $\mu = \max \{ \alpha, \sigma \}$, temos :

$$\left| \alpha \int \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} dx + \sigma \int C \cdot v dx \right| \leq \left| \mu(C, v)_{H^1} \right| \leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$

Além disso,

$$\left| v \left(\frac{\partial C}{\partial x}, v \right)_{L^2} \right| \leq V \left\| \frac{\partial C}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq V \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$

Pois, para $u \in H^1(I)$:

$$\|u\|_{H^1} = \|u\|_{L^2} + \|u'\|_{L^2}$$

¹⁵ *Mensurabilidade* é uma questão complicada. Neste texto o argumento é simplificado, quando dizemos que funções integráveis são mensuráveis, já que a integral é, de certo modo, uma medida.

¹⁶ Esta desigualdade garante que, num espaço vetorial com produto interno vale $|(u, v)| \leq \|u\|_p \|v\|_q$, onde p e q são tais que $1/p + 1/q = 1$. Aqui temos, $p=q=2$, e a desigualdade também é conhecida como de Cauchy.

Logo :

$$|A(t; C, v)| \leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + V \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$

E a continuidade do operador A está provada para $M = \mu + V$.

A condição (iii) do teorema de Lions pode ser encarada como uma certa coercividade (no lema de Lax-Milgram a coercividade é mais exigente: $\lambda = 0$ na condição (iii)). A prova de que o nosso operador é coercivo neste sentido se apóia também na desigualdade de Hölder e numa desigualdade para números reais a, b e $\varepsilon \neq 0$ quaisquer:

$$-ab \geq -\varepsilon a^2/4 - b^2/\varepsilon$$

Estaremos usando Hölder quando fizermos :

$$-V \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq V \left(\frac{\partial v}{\partial x}, v \right) \leq V \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2}$$

Disso tudo resulta :

$$\begin{aligned} A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 &\geq \alpha \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2}^2 - V \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 \|v\|_{L^2}^2 \geq \\ &\geq \alpha \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2}^2 - \frac{V\varepsilon}{4} \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 - \frac{V}{\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2 \geq \\ &\geq \left(\alpha - \frac{V\varepsilon}{4} \right) \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left(\sigma + \lambda - \frac{V}{\varepsilon} \right) \|v\|_{L^2}^2 \\ &\geq \delta \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \|v\|_{L^2}^2 \right) = \delta \|v\|_{H^1}^2 \end{aligned}$$

Como λ e ε são arbitrários, podemos escolhê-los convenientemente de tal sorte que, tomando $\delta = \min \{ \alpha - V\varepsilon / 4, \sigma + \lambda - V / \varepsilon \}$, podemos garantir que $\delta > 0$, e a coercividade especial está provada.

Quanto à continuidade do operador $L_f(v)$, ela também é consequência direta da desigualdade de Hölder e do fato de que, sendo $f \in L^2(I \times J)$, ela é limitada:

$$|L_f(v)| = \left| \int_I f v \, dx \right| \leq \|f\|_{L^2} \|v\|_{L^2}, \quad \text{para todo } v \in L^2(I)$$

Assim, mostramos que o problema proposto (5) tem uma solução dentro daquela linguagem. A questão é : ainda não temos a solução, apenas sabemos que ela existe e é única.

Uma Segunda Aproximação

Vamos lembrar o que foi feito até agora. Querendo descrever a concentração de um poluente numa lagoa, escrevemos um conjunto de equações (2) traduzindo a natureza do problema em linguagem matemática. Isso já foi uma primeira aproximação do problema original, já que partimos de uma série de pressupostos sobre as condições naturais do problema de maneira a poder adequá-las à nossa linguagem. Em seguida rescrevemos a formulação clássica (2) na forma fraca (5) e mostramos que existe uma única solução dentro desta linguagem.

A questão é que encontrá-la não é tarefa fácil. O que faremos é escrever um problema variacional aproximado, que será visto então como uma segunda aproximação do problema original. Com uma vantagem : esta é uma aproximação dentro da própria linguagem matemática, então poderemos dizer quão boa (podendo “boa” ser qualificado dentro desta linguagem) será a solução aproximada. Esta medida não pode ser feita facilmente com relação a nossa primeira aproximação, a menos que possamos acompanhar a difusão do poluente “in loco”, medi-lo e compará-lo à nossa solução matemática.

Método de Galerkin

Segundo Brézis [3] o espaço de Hilbert $H_0^1(I)$ é *separável*¹⁷, assim podemos exibir uma sucessão de vetores $(\omega_n)_{n \in \mathbb{N}} \in H_0^1(I)$ tais que :

- (i) Para cada m , os vetores $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m$ são *ortonormais*;
- (ii) As combinações lineares finitas dos ω_n são densas em $H_0^1(I)$.

Baseado nisso escrevemos o problema aproximado. Denotaremos por $\mathcal{V}_m$ o subespaço dimensão finita de $H_0^1(I)$ gerado pelos m primeiros vetores ω_m . Procuramos então $C_m \in \mathfrak{I}_m$ tal que :

$$(6) \quad \left(\frac{\partial C_m}{\partial t}, v \right) + A(t; C_m, v) = L_f(v), \quad \text{para todo } v \in \mathcal{V}_m$$

Onde :

$$\mathfrak{I}_m = \left\{ C_m \in L^2((0, \tau), \mathcal{V}_m) : \forall t \in (0, \tau], \frac{\partial C_m}{\partial t} \in \mathcal{V}_m \right\}$$

Como $\mathcal{V}_m$ é um subespaço de dimensão finita, ele é completo (ver Kreyszig [15]), portanto é ele mesmo um espaço de Hilbert. Assim estamos nas condições do teorema de Lions para $\mathcal{V}_m$, o que nos permite dizer que existe uma única solução, C_m , para (6).

Mas, o que a solução aproximada de (6), C_m , tem a ver com a solução de (5), C ? Sob estas condições, isto é, $H_0^1(I)$ ser separável e por conseguinte admitir uma *base Hilbertiana*¹⁸, Lions [17] garante a convergência fraca de C_m para C à medida que se aumenta a dimensão do subespaço de dimensão finita m . Isto justifica o uso de um método de aproximações sucessivas para encontrar a solução do problema variacional.

Como $C_m \in \mathcal{V}_m$, podemos escrever C_m como combinação linear dos elementos da base deste espaço :

¹⁷ Um espaço vetorial é separável se admite um subespaço enumerável denso. Como $L^2(I)$ é separável e subespaços de espaços separáveis também o são, $H_0^1(I)$ é separável.

¹⁸ É a base $\{ w_i \}$ descrita acima.

$$C_m(x, t) = \sum_{i=1}^m \beta_i(t) \omega_i(x)$$

E o mesmo para $\partial C_m / \partial t$:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_m(x, t) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_i(t)}{\partial t} \omega_i(x)$$

Em função da (bi)linearidade dos operadores que aparecem em (6) escrevemos:

$$(7) \quad \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_i(t)}{\partial t} (\omega_i, \omega_j) + \sum_{i=1}^m \beta_i(t) A(t; \omega_i, \omega_j) = L_f(\omega_j), \text{ para todo } j = 1, \dots, m$$

Que é um sistema de equações diferenciais ordinárias (*EDO's*), escrito matricialmente como:

$$(8) \quad \mathbf{B} \frac{d\beta}{dt} + \mathbf{A} \beta = \mathbf{f}$$

Onde :

$\mathbf{B}$ é a matriz $m \times m$, que tem na posição (i, j) o elemento (ω_i, ω_j) ;

$\mathbf{A}$ é a matriz $m \times m$, que tem na posição (i, j) o elemento $A(t; \omega_j, \omega_i)$;

$\mathbf{f}$ é o vetor de componentes $L_f(\omega_j)$.

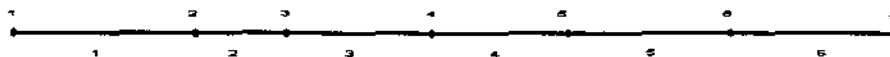
Resta-nos resolver este sistema. Mais tarde voltaremos à questão de como resolvê-lo. Nossa preocupação agora será trabalhar com as matrizes $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ acima de maneira a simplificar esta resolução. Isto depende da escolha das *funções de base* ω_j , de modo a facilitar a resolução das integrais em (7), e manter uma *estrutura de banda* nas matrizes, que gostaríamos que fossem “bastante *esparsas*”¹⁹.

¹⁹ Uma matriz tem *estrutura de banda* quando tem os elementos não nulos concentrados em subdiagonais, “próximas” à diagonal principal e é dita *esparsa* quando tem “muitos” zeros (cf. [28]).

Método dos Elementos Finitos

Vimos que, pelo método de Galerkin, escrevemos um problema variacional aproximado, e que encontrar sua solução corresponde a resolver o sistema de *EDO's* dado por (8). Podemos tornar este trabalho ainda mais simples se formos cuidadosos na escolha das *funções de base* ω_j . Escolheremos estas funções pelo método dos elementos finitos, uma ferramenta bastante utilizada para discretização espacial.

No caso unidimensional, dividimos o domínio em um número finito de nós, e um *elemento* da nossa discretização é um intervalo fechado compreendido entre dois nós adjacentes, os próprios nós e as funções de base que são definidas sobre cada nó. A figura abaixo exemplifica uma divisão possível num domínio tipo coluna d'água :



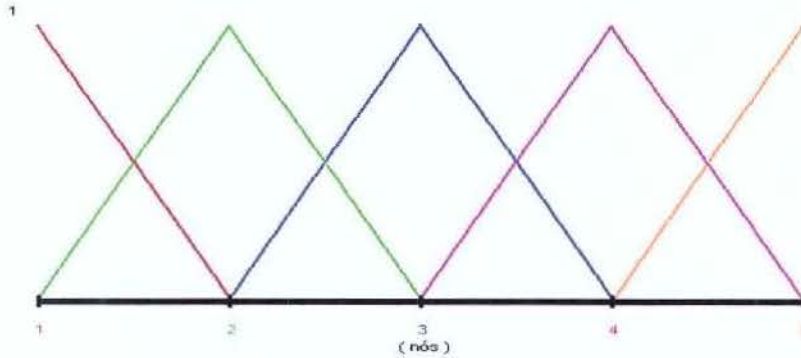
Os intervalos podem ser iguais ou diferentes entre si. O mais natural pode parecer uma divisão do domínio de maneira uniforme. Entretanto, a menos que haja uma razão muito clara para isso, o domínio é dividido em intervalos diferentes. Considere o caso de uma coluna d'água muito profunda e de uma população que já se sabe, a priori, que tem uma tendência a se concentrar numa certa faixa contemplada por uma certa quantidade de luz. Na descrição desta dinâmica via elementos finitos não há necessidade de termos muitos elementos perto do fundo, já que a concentração da população pode ser considerada nula a partir de certa altura.

Em seguida definimos as *funções de base* ω_i sobre cada nó i . Isto pode ser feito de diversas formas. Podemos escolher funções lineares por partes, quadráticas por partes, Aqui usamos as lineares. Definidas de maneira muito simples, são tais que :

$$\omega_j(i) = 1, \text{ se } i = j;$$

$$\omega_j(i) = 0, \text{ se } i \neq j.$$

Repare-se que cada função se anula ω_j fora da região compreendida entre os nós $j - 1$ e $j + 1$. Seu aspecto é o de um triângulo sobre cada nó :



E então percebemos a grande vantagem deste método, dado que a integração de funções lineares e/ou quadráticas (solicitadas pelo método de Galerkin), é extremamente simples. Além disso, o método trabalha num elemento padrão, e as integrais em cada elemento são calculadas, via transformação de variáveis, em tal elemento padrão. É fundamental ressaltar que estas funções tem que satisfazer as condições de fronteira do problema diferencial. No exemplo que apresentamos, as condições dizem que a concentração é nula na fronteira da coluna, e neste caso não teríamos as funções de base 1 (marrom) e 5 (laranja) mostradas acima.

Não é objetivo deste texto apresentar uma teoria completa sobre os elementos finitos. Ao fazê-lo informalmente, a intenção é apenas dar uma idéia do método usado para resolver os problemas de poluição em lagoas do sistema Iberá. Uma leitura mais cuidadosa sobre elementos finitos pode ser feita no clássico de Oden [5].

Uma coisa interessante que pode acontecer no caso difusivo-advectivo é que os termos difusivo e advectivo competem para governar o fenômeno. Isso acontece toda vez que a relação de *Péclet*, P , não é satisfeita. Esta condição exige que :

$$P_i := \frac{V \Delta x_i}{\alpha} \leq 2, \text{ onde } \Delta x_i \text{ é a distância entre os nós } i \text{ e } i+1$$

A figura (4) no capítulo IV dá uma idéia do que pode acontecer no caso em que $P_i > 2$ este problema é contornado refinando-se a discretização, o que diminui o valor de Δx_i , mas pode sobrecarregar em demasia as dimensões do sistema a ser resolvido. Outra maneira de se contornar esta questão é o uso de funções tipo *upwind*, de que são exemplo funções quadráticas assimétricas, resultantes da deformação das funções lineares na direção de V , sobre cada nó²⁰. No caso que estudamos não foi necessário fazermos uso de tal técnica, já que o refinamento da discretização foi mais eficiente (preferimos aumentar a ordem do sistema que não era grande a ter que refazer as integrais). Para o caso da coluna d'água, foram escritos programas no *Matlab*®, usando as funções lineares já apresentadas.

Crank-Nicolson

Por termos usado o método de Galerkin, nosso problema agora é resolver o sistema de *EDO's* (8). Este sistema também será resolvido de forma aproximada - e esta será a terceira aproximação²¹ para o problema original - usando o método de Crank-Nicolson.

Já temos o domínio espacial discretizado e faremos o mesmo para o tempo, escrevendo $\beta_i^{(n)} \approx \beta_i(t_n)$ para o valor da função coeficiente que multiplica a função de base ω_i , no instante t_n .

$$C_m(x, t_n) \approx \sum_{i=1}^m \beta_i^{(n)} \omega_i(x)$$

Neste método consideramos o valor de β e de sua derivada num instante que não faz parte da discretização temporal, tomando :

²⁰ Em Hughes [3] in Mistro [22] você encontra o número de Péclet e um desenho das funções *upwind* nos casos uni e bidimensional.

$$(9) \quad \frac{d\beta_i^{(n+1/2)}}{dt} \approx \frac{\beta_i^{(n+1)} - \beta_i^{(n)}}{\Delta t}$$

$$\beta_i^{(n+1/2)} \approx \frac{\beta_i^{(n+1)} + \beta_i^{(n)}}{2}$$

Estas aproximações são da ordem de $(\Delta t)^2$, que é o intervalo de tempo entre dois instantes sucessivos. Substituindo estas aproximações no sistema de EDO's (8), resulta o sistema linear :

$$(10) \quad C\beta^{(n+1)} = D\beta^{(n)} + f^{(n+1/2)}$$

Onde :

$$C = (2 B + \Delta t A)$$

$$D = (2 B - \Delta t A)$$

$$f^{(n+1/2)} = \frac{f^{(n)} + f^{(n+1)}}{2}$$

E as matrizes **A** e **B** são aquelas que definimos quando introduzimos o método de Galerkin.

Este é o passo final para a resolução do nosso problema. Começando por $\beta^{(0)}$:

$$C_0(x_j) = \beta_j^{(0)}, \text{ para todo } j = 1, \dots, n^\circ \text{ de nós}$$

Tendo $\beta^{(0)}$, calculamos $\beta^{(1)}$ resolvendo :

$$C\beta^{(1)} = D\beta^{(0)} + f$$

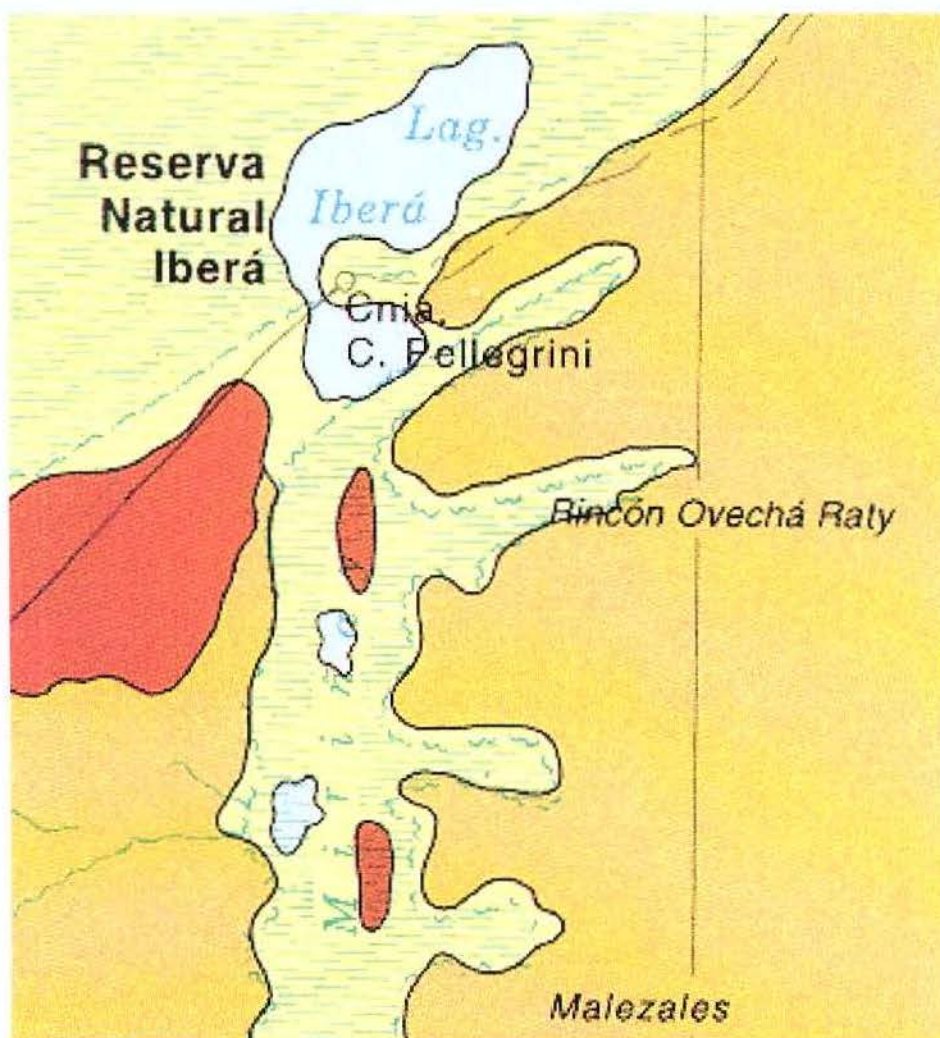
E assim sucessivamente, resolvemos $n+1$ sistemas lineares da dimensão do número de nós, para descobrir os coeficientes β_i sobre cada nó do domínio. Com eles e com as funções de base, temos a solução aproximada !

²¹ Na verdade temos mais aproximações do que as três mencionadas aqui. Devemos ressaltar aquelas devidas a representação de números em linguagem de computador, resolução de sistemas lineares ...

III

Poluentes que bóiam

Não é sempre que podemos tratar do problema de poluição em corpos aquáticos usando a coluna d'água. Como foi visto antes, para usá-la dependemos de uma certa simetria da lagoa, coisa com a qual nem sempre podemos contar. No próprio sistema Iberá, a lagoa *Iberá* tem características diferentes daquelas Luna e Galarza. Esta lagoa alimenta o rio *Miriñay*, a sudeste, através dos *Esteros del Miriñay*. Isto cria uma pequena correnteza na direção do desaguamento da lagoa. Esta situação é claramente assimétrica. Estaremos estudando, neste caso, a presença de um poluente que não afunda, permanecendo na superfície da lagoa.



O Domínio

Neste caso o domínio espacial, Ω , é um subconjunto do $\mathbb{R}^2$, cujo desenho é o da superfície da lagoa. Consideraremos Ω como sendo somente o interior deste desenho de tal forma a manter o conjunto aberto. As margens da lagoa compõem a fronteira de Ω , que chamaremos de Γ . Dividiremos esta fronteira em dois pedaços diferentes : Γ_2 , onde a lagoa encontra os esteros do rio Mirinhay; e Γ_1 , que é todo o resto da margem (esta divisão deve ficar mais clara adiante). O domínio temporal é o mesmo que no caso da coluna.

As Equações

Como anteriormente, descreveremos a dinâmica do poluente boiando sobre a superfície da lagoa por uma *EDP e condições iniciais e de fronteira*. Esta equação descreve a variação da concentração do poluente em cada ponto da superfície da lagoa a medida que o tempo passa, mediante a presença de certos fenômenos, sujeito às condições impostas sobre as margens da lagoa, e a partir de uma configuração inicial de concentração do poluente.

$$(11) \quad \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(\alpha \cdot \nabla C) - \text{div}(V \cdot C) - \sigma C + f, & \text{em } \Omega \times (0, t] \\ \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = 0, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ \alpha \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = -p \cdot C \Big|_{\Gamma_2}, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y), & \text{para todo } (x, y) \in \overset{\circ}{\Omega} \end{cases}$$

E a mesma observação feita no capítulo anterior quanto ao uso dos operadores gradiente e divergente vale aqui: consideramos estas operações somente sobre as variáveis espaciais.

O Que Dizem as Equações

A descrição da dinâmica difusiva-advectiva do poluente flutuando sobre a superfície da lagoa, (11), é válida para cada posição (x,y) sobre a lagoa, e cada instante t durante a observação do fenômeno.

Do mesmo modo que no caso unidimensional, temos dinâmica difusiva, $div(\alpha \nabla C)$; movimento convectivo, $div(V.C)$; decaimento, σC ; e a presença de uma fonte poluente, f . Em seguida aparecem as condições de fronteira, que aqui são um pouco diferentes. Dizemos que não há fluxo pelas margens da lagoa na região Γ_1 ; e que o fluxo é proporcional à concentração do poluente na região Γ_2 . Estas duas condições são válidas para todo o instante t , com exceção de $t=0$, onde temos uma configuração inicial do poluente distribuído pela superfície da lagoa dada por $C_0(x,y)$. O termo de fluxo através da margem é dado pela sua *derivada parcial normal*, $\partial C / \partial \eta$ onde η é uma direção ortogonal unitária externa ao domínio.

Simplificações

Também aqui faremos as mesmas simplificações que foram feitas para o caso da coluna d'água, considerando os coeficientes α e σ , constantes. A velocidade $V = (v_x, v_y)$ tem duas direções que serão consideradas constantes, ao menos em cada região a ser definida sobre a lagoa. Com estas simplificações reescrevemos a EDP em (11) :

$$(12) \quad \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \Delta C - V \cdot div(C) - \sigma C + f, & \text{em } \Omega \times (0, t] \\ \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = 0, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ \alpha \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = -p.C \Big|_{\Gamma_2}, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y), & \text{para todo } (x, y) \in \overset{\circ}{\Omega} \end{cases}$$

Abusamos no uso do gradiente e divergente da concentração C , e consideramos operadores somente sobre suas dimensão espaciais, (x,y) . Como já foi visto, o

tratamento matemático do problema diferencial é muito complicado e um pouco restrito, por isso partiremos para uma formulação fraca.

Formulação Variacional

Na descrição do problema (12) em sua *forma fraca* pouca coisa vai mudar. Agora temos que trabalhar em duas dimensões espaciais e temos condições de fronteira um pouco diferentes. No que segue estaremos fazendo a mesma coisa que foi feita no caso unidimensional, adaptando somente a linguagem ao nosso domínio bidimensional. Assim formularemos o problema fracamente; discutiremos existência e unicidade de solução fraca, e como encontrá-la pelo método de Galerkin; e por fim discutiremos a discretização do domínio via elementos finitos.

Nossa *função teste* $v: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ agora é bidimensional definida sobre a superfície do lago. Além disso, queremos que ela satisfaça as condições de fronteira (da mesma maneira que na coluna d'água) que aparecem em (12). Por enquanto o espaço V destas funções teste será o espaço das funções v tais que $\partial v / \partial \eta = 0$ em Γ_1 .

Multiplicando a EDP em (12) por $v \in V$, obtém-se :

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cdot v = \alpha \Delta C \cdot v - V \cdot \text{div}(C) \cdot v - \sigma C \cdot v + f \cdot v$$

Integrando a equação acima em Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v d\mathbf{x} - \alpha \int_{\Omega} \Delta C \cdot v d\mathbf{x} + \int_{\Omega} V \cdot \text{div}(C) \cdot v d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C \cdot v d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f \cdot v d\mathbf{x}$$

Na integral acima como nas demais, estamos considerando a medida $d\mathbf{x}$ como sendo uma medida bidimensional, $dx dy$, para simplificar a notação. Trocaremos a segunda integral acima, por causa do teorema de Green :

$$-\alpha \int_{\Omega} \Delta C . v d\mathbf{x} = -\alpha \oint_{\Gamma} \frac{\partial C}{\partial \eta} . v ds + \alpha \int_{\Omega} \nabla C . \nabla v d\mathbf{x}$$

E, pelas condições de fronteira em (11) a integral de linha acima é igual a :

$$-\alpha \oint_{\Gamma} \frac{\partial C}{\partial \eta} . v ds = -\alpha \oint_{\Gamma_2} \frac{\partial C}{\partial \eta} . v ds = p \oint_{\Gamma_2} C . v ds$$

E então obtemos :

$$(13) \quad \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} . v d\mathbf{x} + \alpha \int_{\Omega} \nabla C . \nabla v d\mathbf{x} + p \oint_{\Gamma_2} C . v ds + \int_{\Omega} \mathbf{V} \cdot \text{div}(C) . v d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C . v d\mathbf{x} = \\ = \int_{\Omega} f . v d\mathbf{x}, \text{ para toda } v \in \mathcal{V}$$

Esta será a *formulação fraca* de (12), assim que especificarmos melhor que espaço de funções é este $\mathcal{V}$.

Distribuições sobre Ω

A idéia para definir as distribuições sobre um conjunto aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ é a mesma que para $I \subset \mathbb{R}$. Partiremos do espaço das funções que têm derivadas parciais contínuas de todas as ordens em Ω , $C_0^\infty(\Omega)$ com aquela noção de *convergência* introduzida antes, isto é, diremos que uma *seqüência* $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ *converge* para 0 quando :

- (i) as funções φ_n têm suporte contido em um compacto $K \subset \Omega$.
- (ii) além da seqüência $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, também as seqüências das suas derivadas parciais de todas as ordens *convergem uniformemente* para 0.

Então diremos que $\mathcal{D}(\Omega)$ é $C_0^\infty(\Omega)$ com esta noção de convergência. As distribuições serão os funcionais lineares contínuos em $\mathcal{D}(\Omega)$, portanto o espaço vetorial das distribuições é dual deste espaço, $\mathcal{D}'(\Omega)$. A notação e a convergência em $\mathcal{D}'(\Omega)$ é a mesma que em $\mathcal{D}'(I)$.

Em Busca do $\sqrt{\text{Adequado}}$

De maneira análoga a $L^1_{\text{loc}}(I)$, definimos o espaço $L^1_{\text{loc}}(\Omega)$, e associamos univocamente a cada seu elemento u uma distribuição. Por exemplo, fazendo :

$$\langle T, \varphi \rangle := \int_K u(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$$

Para poder escrever $L^1_{\text{loc}}(\Omega) \subset \mathcal{D}'(\Omega)$.

Derivadas Parciais de Distribuições

A única diferença entre esta seção e aquela sobre derivadas de distribuições é que agora, por estarmos em duas dimensões precisamos da noção de derivada parcial.

Nosso Ω é um subconjunto do $\mathbb{R}^2$ mas a generalização para o $\mathbb{R}^n$ é automática.

A idéia de derivada parcial de uma distribuição T de $\mathcal{D}'(\Omega)$ é análoga à de derivada ordinária de uma distribuição de $\mathcal{D}'(I)$. Sua derivada parcial fraca na direção da i -ésima componente é denotada por $\partial T / \partial x_i$ e é a única distribuição tal que :

$$\langle \frac{\partial T}{\partial x_i}, \varphi \rangle = - \langle T, \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \rangle, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$$

As distribuições também possuem derivadas parciais fracas de todas as ordens :

$$\langle \partial \frac{\partial^n T}{\partial x_i^n}, \varphi \rangle = (-1)^n \langle T, \frac{\partial^n \varphi}{\partial x_i^n} \rangle, \text{ para toda } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$$

Espaços de Sobolev

Como antes, queremos distribuições cujas derivadas parciais fracas também sejam distribuições, por isso introduzimos o espaço $H^1(\Omega)$ equipado com o seguinte produto interno e a seguinte norma :

$$(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\mathbf{x} + \int_{\Omega} u \cdot v d\mathbf{x}$$
$$\|v\|^2 = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} |v|^2 d\mathbf{x}$$

Equipado com esta norma, $H^1(\Omega)$ é um espaço de *Hilbert* real.

Finalmente, o $\sqrt{\cdot}$ Adequado

Trabalharemos num subespaço de $H^1(\Omega)$, o $H_*^1(\Omega)$, definido abaixo :

$$H_*^1(\Omega) = \{ w \in H^1(\Omega) : \frac{\partial w}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = 0, w \in L^2(\Gamma_2) \}$$

Da sequência de inclusões abaixo :

$$H_*^1(\Omega) \subset H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega) \subset H^{1'}(\Omega) \subset \mathcal{D}'(\Omega)$$

Podemos perceber que se tomarmos $\sqrt{\cdot} = H_*^1(\Omega)$, os elementos de $\sqrt{\cdot}$ serão distribuições (portanto com derivadas parciais fracas de todas as ordens) que têm derivada parcial normal igual a zero no trecho adequado da fronteira de Ω (Γ_1) e que têm quadrado integrável sobre Γ_2 . Isto nos permite trocar as integrais :

$$-\alpha \oint_{\Gamma_1} \frac{\partial C}{\partial \eta} \cdot v ds = -\alpha \oint_{\Gamma_1} \frac{\partial C}{\partial \eta} \cdot v ds + -\alpha \oint_{\Gamma_2} \frac{\partial C}{\partial \eta} \cdot v ds = p \oint_{\Gamma_2} C \cdot v ds$$

Pois, sobre Γ_1 , temos $\partial C / \partial \eta = 0$; e sobre Γ_2 , temos v e $\partial C / \partial \eta$ integráveis.

Escrevemos então a formulação fraca :

$$(14) \quad \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v d\mathbf{x} + \alpha \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla v d\mathbf{x} + p \oint_{\Gamma_2} C \cdot v ds + \int_{\Omega} \mathbf{V} \cdot \text{div}(C) \cdot v d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C \cdot v d\mathbf{x} = \\ = \int_{\Omega} f \cdot v d\mathbf{x}, \text{ para toda } v \in H_*^1(\Omega)$$

O próximo passo é uma investigação sobre a solução de (14).

Existência e Unicidade

Usaremos o mesmo teorema de Lions, e a argumentação da prova será análoga ao caso unidimensional, com as devidas adaptações. Rescreveremos a equação (14) como :

$$(15) \quad \left(\frac{\partial C}{\partial t}, v \right) + A(t; C, v) = L_f(v), \text{ para todo } v \in H_*^1(\Omega)$$

Onde :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C}{\partial t}, v \right) &:= \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \cdot v d\mathbf{x} \\ A(t; C, v) &:= \alpha \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla v d\mathbf{x} + p \oint_{\Gamma_1} C \cdot v ds + \int_{\Omega} \mathbf{V} \cdot \text{div}(C) \cdot v d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C \cdot v d\mathbf{x} \\ L_f(v) &:= \int_{\Omega} f \cdot v d\mathbf{x} \end{aligned}$$

O teorema de Lions garante a existência de uma única solução $C \in \mathfrak{F}$ do problema (15) se $\mathfrak{V}$ é um espaço de Hilbert e se :

- (i) $\forall C \in \mathfrak{F}, \forall v \in \mathfrak{V}$, a função $t \rightarrow A(t; C, v)$ é *mesurável*;
- (ii) $|A(t; C, v)| \leq M \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}$, com M uma constante positiva;
- (iii) $\exists \lambda$ tal que $A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \delta \|v\|_{H^1(\Omega)}^2$, com $\delta > 0$ e $v \in \mathfrak{V}$;
- (iv) $L_f(v)$ é contínuo ; e
- (v) $f \in L^2(\Omega)$ e $C_0 \in H_0^1(\Omega)$.

Onde :

$$\mathfrak{S} = \left\{ C \in L^2((0, \tau), H_*^1(\Omega)) : \forall t \in (0, \tau], \frac{\partial C}{\partial t} \in L^2(\Omega) \right\}$$

A demonstração é quase uma cópia da demonstração anterior. A validade de (i) e de (v) justifica-se pela própria natureza da fonte e da condição inicial. A continuidade de L_f (iv) é baseada em argumentação idêntica à anterior. Quanto aos outros itens, uma pequena alteração na argumentação será necessária devida ao termo da integral de linha na forma A . Usaremos o resultado de Medeiros [21] abaixo :

Se Ω é um domínio *bem regular*¹ então existe uma constante $k > 0$, tal que :

$$\|v\|_{L^2(\Gamma)} \leq k \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

Como antes, a continuidade de $A(t; C, v)$ parte da desigualdade :

$$\left| \alpha \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C \cdot v d\mathbf{x} \right| \leq |\mu(C, v)_{H^1}| \leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$

Onde $\mu = \max \{ \alpha, \sigma \}$. Além disso, temos :

$$\begin{aligned} |(V, \text{div}(C), v)_{L^2}| &= \left| \int_{\Omega} (v_1 \frac{\partial C}{\partial x} + v_2 \frac{\partial C}{\partial y}) \cdot v d\mathbf{x} \right| = \left| \int_{\Omega} v_1 \frac{\partial C}{\partial x} \cdot v d\mathbf{x} + \int_{\Omega} v_2 \frac{\partial C}{\partial y} \cdot v d\mathbf{x} \right| \leq \\ &\leq |v_1| \left(\frac{\partial C}{\partial x}, v \right)_{L^2} + |v_2| \left(\frac{\partial C}{\partial y}, v \right)_{L^2} \leq (|v_1| \left\| \frac{\partial C}{\partial x} \right\|_{L^2} + |v_2| \left\| \frac{\partial C}{\partial y} \right\|_{L^2}) \|v\|_{L^2} \leq \\ &\leq V_{\max} \|C\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq V_{\max} \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1}, \text{ onde } V_{\max} = \max\{|v_1|, |v_2|\} \end{aligned}$$

Logo :

$$|A(t; C, v)| \leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + V_{\max} \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + \left| p \cdot \int_{\Gamma_2} C \cdot v d\mathbf{x} \right| \leq$$

¹ A definição de conjunto bem regular não é trivial. Pode ser encontrada no próprio Medeiros [21]. Mas isso não nos preocupa, pois sua intenção é tornar o resultado o mais geral possível. Quanto a nós, podemos supor, sem risco nenhum supor que Ω é bem regular.

$$\begin{aligned}
&\leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + V_{\max} \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + p \|C\|_{L^2(\Gamma)} \|v\|_{L^2(\Gamma)} \leq \\
&\leq \mu \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + V_{\max} \|C\|_{H^1} \|v\|_{H^1} + p.k_1.k_2 \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}
\end{aligned}$$

E a continuidade do operador A está provada para $M = \mu + V_{\max} + p.k_1.k_2$

Para aquela coercividade especial (iii) o argumento se apoia nos mesmo argumentos que no capítulo II e no fato de que :

$$A(t; v, v) = B(t; v, v) + p \|v\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

Onde:

$$B(t; C, v) := \alpha \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla v d\mathbf{x} + \int_{\Omega} V \cdot \text{div}(C) \cdot v d\mathbf{x} + \sigma \int_{\Omega} C \cdot v d\mathbf{x}$$

Além disso, para números reais a, b e $\varepsilon \neq 0$ quaisquer vale :

$$- a b \geq - \varepsilon a^2 / 4 - b^2 / \varepsilon$$

E a desigualdade de Hölder também se verifica em $L^2(\Omega)$:

$$- V_{\max} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) \|v\|_{L^2} \leq V(\text{div}(C), v) \leq V_{\max} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) \|v\|_{L^2}$$

Disso tudo resulta :

$$\begin{aligned}
&A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \geq B(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \geq \\
&\geq \alpha \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2}^2 - V_{\max} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) \|v\|_{L^2} \geq \\
&\geq \alpha \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2}^2 - \frac{V_{\max} \varepsilon}{4} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) - \frac{V_{\max}}{\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2 \geq \\
&\geq \left(\alpha - \frac{V_{\max} \varepsilon}{4} \right) \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2}^2 - \frac{V_{\max}}{\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2 = \delta \|v\|_{H^1}^2
\end{aligned}$$

E a conclusão é como antes, se $\delta = \min \{ \alpha - V_{\max} \varepsilon / 4, \sigma + \lambda - V_{\max} / \varepsilon \} > 0$, devido a arbitrariedade dos parâmetros ε e λ .

Método de Galerkin

O espaço de Hilbert $H^1(\Omega)$ também é separável. Este fato é fundamental para aplicação do método de Galerkin, como foi no caso da coluna d'água. Consideraremos uma sucessão de vetores $(\omega_n)_{n \in \mathbb{N}} \in H^1(I)$ tais que :

- (i) Para cada m , os vetores $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m$ são *linearmente independentes*;
- (ii) As combinações lineares finitas dos ω_n são densas em $H^1(I)$.

Escrevemos então o problema aproximado, partindo de $\sqrt{m}$ o subespaço dimensão finita de $H^1(I)$ gerado pelos m primeiros vetores ω_m . Procuramos então $C_m \in \mathfrak{S}_m$ tal que :

$$(16) \quad \left(\frac{\partial C_m}{\partial t}, v \right) + A(t; C_m, v) = L_f(v), \quad \text{para todo } v \in \sqrt{m}$$

Onde :

$$\mathfrak{S}_m = \left\{ C_m \in L^2((0, \tau), \sqrt{m}) : \forall t \in (0, \tau], \frac{\partial C_m}{\partial t} \in \sqrt{m} \right\}$$

A aplicabilidade do teorema de Lions ao problema (16) deve-se ao fato de que este subespaço é também um espaço de Hilbert, e a questão da convergência da solução aproximada é parecida com o caso unidimensional. Lá as funções de base ω_i satisfaziam as condições de fronteira (pela maneira como foi definido o espaço $\sqrt{m}$), assim, escrevendo a solução aproximada C_m nesta base, automaticamente ficava garantida que tal solução estava sujeita às condições de contorno. Agora é diferente, pois no espaço das funções de base “falta” uma condição de contorno (aquela sobre Γ_2), entretanto, esta condição aparece na equação integral (14) que define o problema, sob a forma de uma integral de linha. Portanto a solução aproximada, C_m , satisfaz a condição sobre Γ_2 .

Como fizemos em uma dimensão, escrevemos C_m na base deste espaço :

$$C_m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \beta_i(t) \omega_i(\mathbf{x})$$

E também $\partial C_m / \partial t$:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_i(t)}{\partial t} \omega_i(\mathbf{x})$$

Lembrando que, por uma questão de simplicidade, escrevemos $\mathbf{x} = (x, y)$.

Como os operadores que aparecem em (16) são (bi)lineares escrevemos :

$$(17) \quad \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_i(t)}{\partial t} (\omega_i, \omega_j) + \sum_{i=1}^m \beta_i(t) A(t; \omega_i, \omega_j) = L_f(\omega_j), \text{ para todo } j = 1, \dots, m$$

Que é um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's), escrito matricialmente como :

$$(18) \quad \mathbf{B} \frac{d\boldsymbol{\beta}}{dt} + \mathbf{A} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}$$

Onde :

$\mathbf{B}$ é a matriz $m \times m$, que tem na posição (i, j) o elemento (ω_i, ω_j) ;

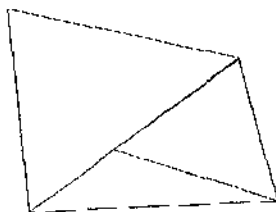
$\mathbf{A}$ é a matriz $m \times m$, que tem na posição (i, j) o elemento $A(t; \omega_j, \omega_i)$;

$\mathbf{f}$ é o vetor de componentes $L_f(\omega_j)$.

Este sistema será resolvido usando-se Crank-Nicolson, como foi feito no caso da coluna. Como é um método para a discretização do domínio temporal, ele é similar àquele que aparece ali. Basta aplicá-lo, assim que tenhamos feito a discretização espacial e escolhido as funções de base, a seguir.

Método dos Elementos Finitos

Em duas dimensões o trabalho com os elementos finitos é mais interessante, pois é mais complicado. Imagine que temos liberdade de escolher não só o tamanho, mas também a forma dos elementos : quadrados, triângulos... A única regra é que cada aresta da discretização pode ser compartilhada por no máximo dois elementos. A triangulação a seguir, por exemplo, é proibida :



Da mesma maneira que no caso unidimensional, podemos definir funções de base lineares, quadráticas, ... Se tomarmos funções de base lineares, seu aspecto será de uma pirâmide sobre cada nó. Da mesma forma que antes, teremos o valor da função de base ω_j sobre o nó i valendo :

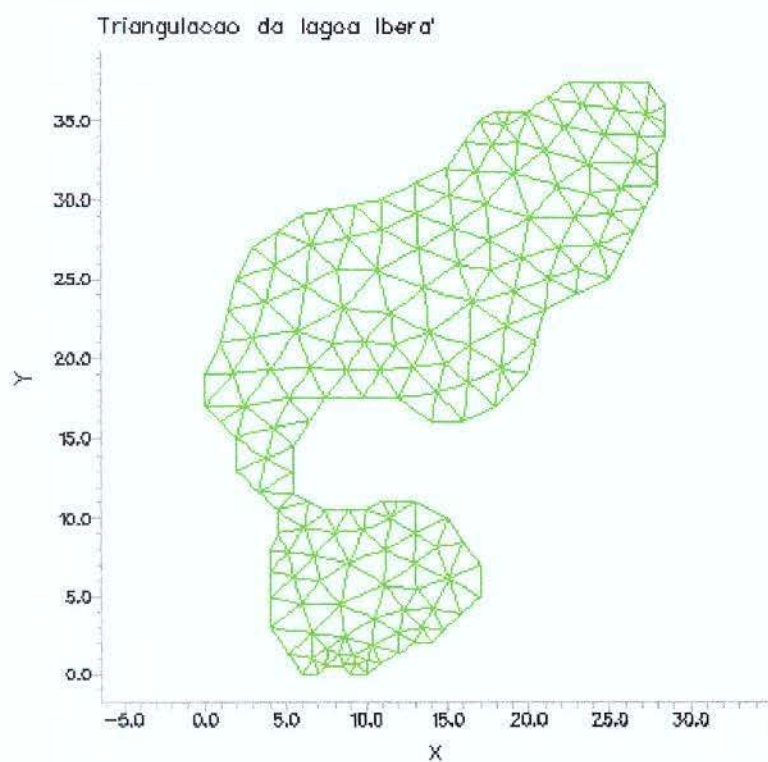
$$\omega_j(i) = 1, \text{ se } i = j;$$

$$\omega_j(i) = 0, \text{ se } i \neq j.$$

Uma questão interessante é que a numeração dos nós e elementos não será feita de maneira natural (pois não há como fazê-lo). No caso bidimensional, além da facilidade na integração, a possibilidade de triangular o domínio dá maior liberdade, permitindo uma discretização mais precisa do domínio. Usamos, para o problema da superfície da lagoa, o software *PDEase*®, que trabalha com funções lineares ou quadráticas, dependendo da escolha do usuário. Para dar uma idéia mais precisa da triangulação, exibimos, nas páginas seguintes, a lagoa Iberá triangulada.

Também em duas dimensões podem ocorrer oscilações numéricas se a relação de *Péclet* não for satisfeita. Ao invés de trabalhar com funções *upwind* bidimensionais, o *PDEase*® trabalha com sucessivos refinamentos da malha até que a solução numérica aproxime a solução exata, segundo um erro pré-estabelecido.

Triangulação da Lagoa Iberá com 643 nós e 280 triângulos.



ibdiac2 Grid#1 Nodes=643 Cells=280 PDE Err= 0.0 Mem=296k

10:29:11 1/22/98



IV

Ensaaios Computacionais

Nossa próxima aproximação será a resolução dos sistemas lineares resultantes do uso dos métodos dos elementos finitos e Crank-Nicolson expostos nos capítulos anteriores. Até mesmo a resolução computacional destes sistemas é aproximada, devido a representação numérica no computador e métodos numéricos utilizados na resolução de sistemas de grande porte. Mesmos com estas restrições a resolução dos sistemas é confiável, pois o erro pode ser controlado. Isto viabiliza a solução apresentada.

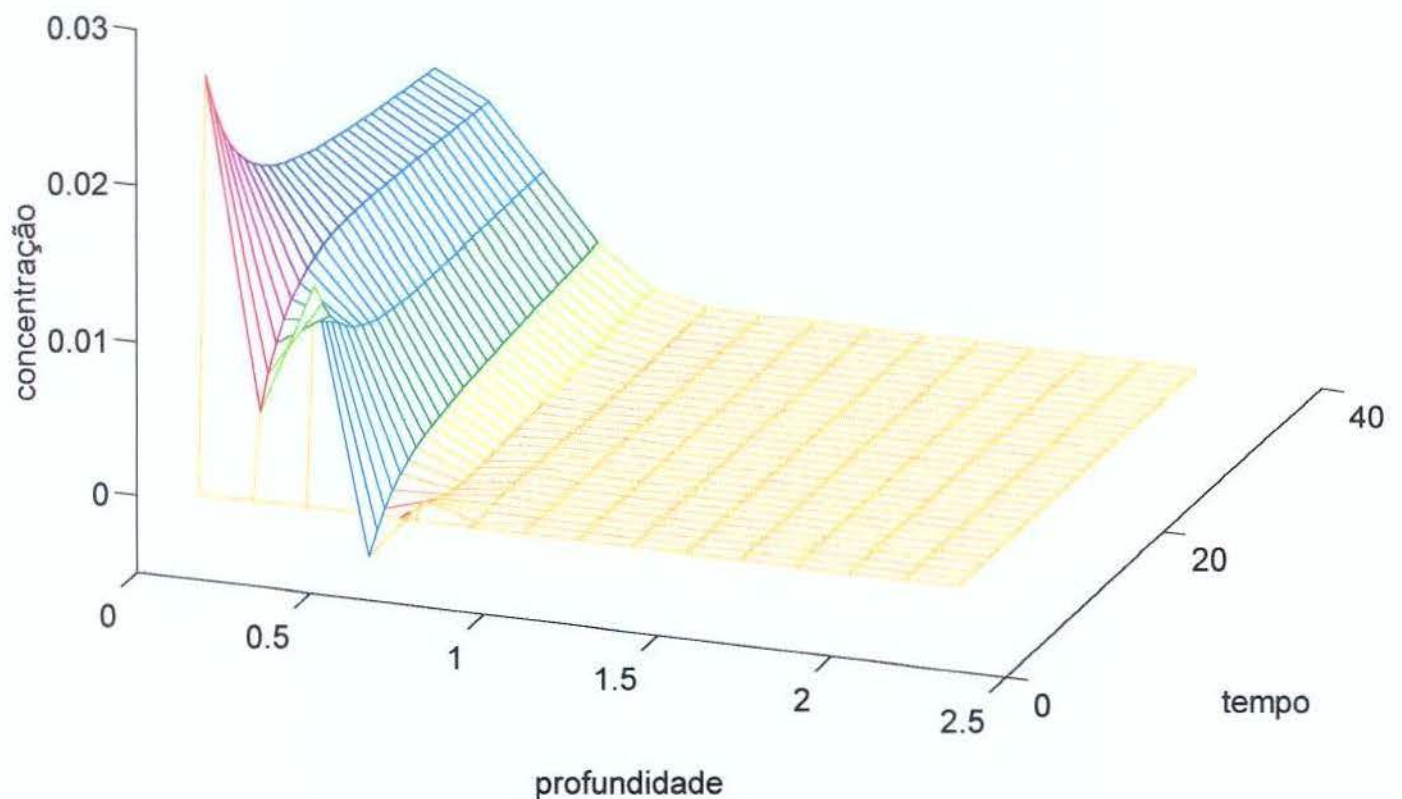
Apresentamos nas páginas seguintes os resultados obtidos na resolução do problema da coluna d'água – usando o *Matlab*® - e da superfície da lagoa Iberá – com o *PDEase*®. Os parâmetros utilizados foram acadêmicos, já que infelizmente não pudemos contar com informações vindas da Argentina.

A figura 1 mostra a solução numérica do problema da coluna d'água sem a presença do termo advectivo, e sem fluxo pela superfície e fundo da coluna. Usamos uma fonte intermitente para modelar uma chuva que cai a intervalos regulares, incidindo apenas sobre o primeiro nó da discretização. Na discretização espacial dividimos a coluna (que supomos com profundidade 2,5 m, a profundidade média da lagoa Luna, cf. [11]) em 16 células igualmente espaçadas. Note-se que a solução ganha “regularidade” com o aumento do número de iterações no tempo. A descrição contínua do fenômeno é dada abaixo, e as questões sobre existência e unicidade de solução e como encontrá-la são semelhantes ao caso apresentado no capítulo II :

$$(19) \quad \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \sigma C + f, & \text{em } (0, h) \times (0, \tau] \\ \frac{\partial C}{\partial \eta}(0, t) = 0, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ C(h, t) = 0, & \text{para todo } t \in (0, \tau] \\ C(x, 0) = C_0(x), & \text{para todo } x \in (0, h] \end{cases}$$

O sistema discretizado é aquele descrito no capítulo II, quando apresentamos o método de Crank-Nicolson. O método de resolução do sistemas lineares escolhido foi a *decomposição LU* pela simplicidade no uso com o *Matlab®*.

Figura 1: Evolução de fenômeno difusivo na coluna com fonte intermitente

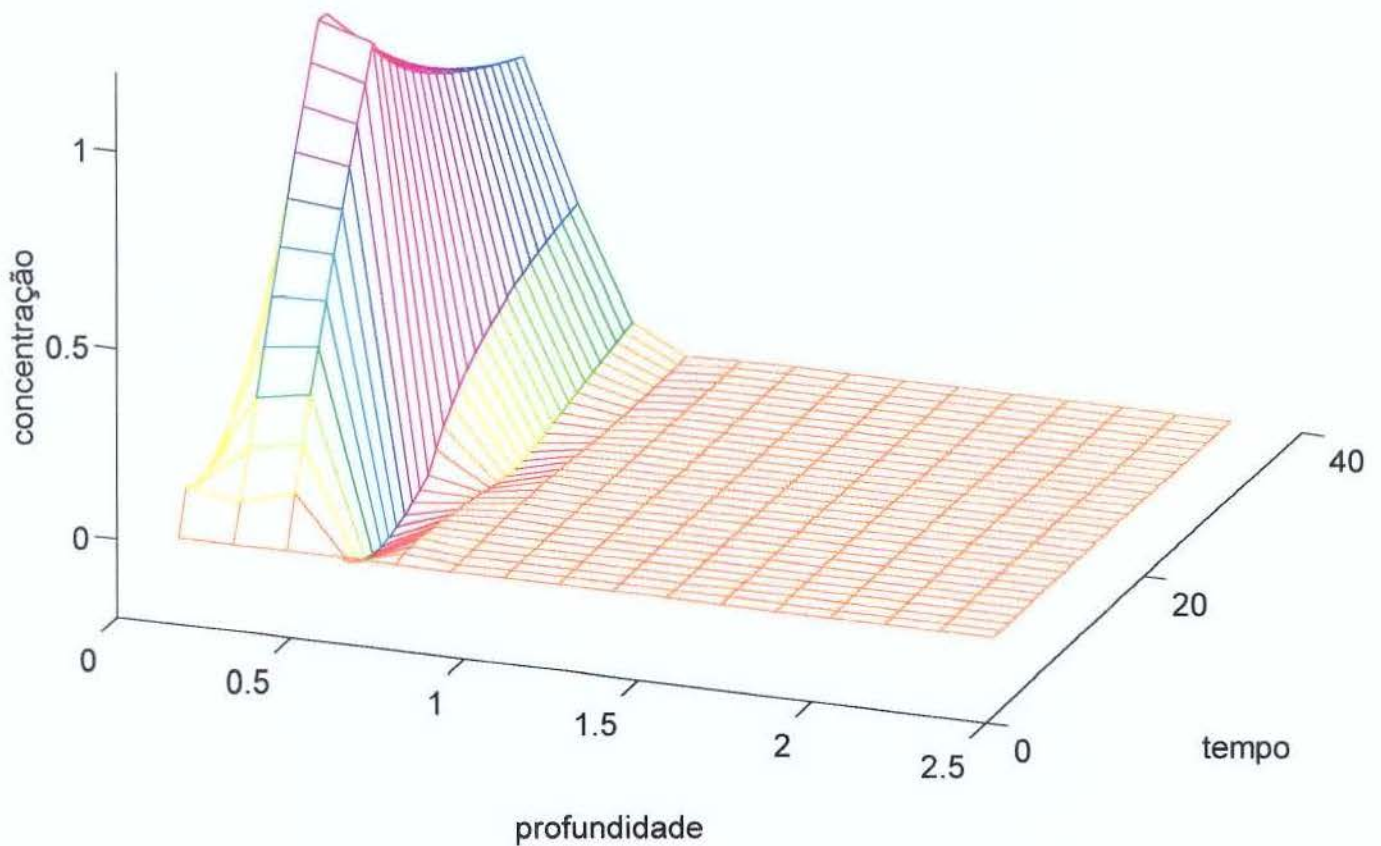


Note-se que apesar da presença de oscilações numéricas nas primeiras iterações temporais, a solução aproximada se comporta bem, no final.

A próxima figura mostra uma pequena variação do caso anterior, onde supomos que uma pequena porcentagem do poluente não flocula. Temos, sobre a superfície da coluna a condição :

$$-\alpha \frac{\partial C}{\partial \eta}(0,t) = p.C, \text{ para todo } t \in (0,\tau]$$

Figura 2 : Evolução difusiva na coluna c/ perda superficial de 8%

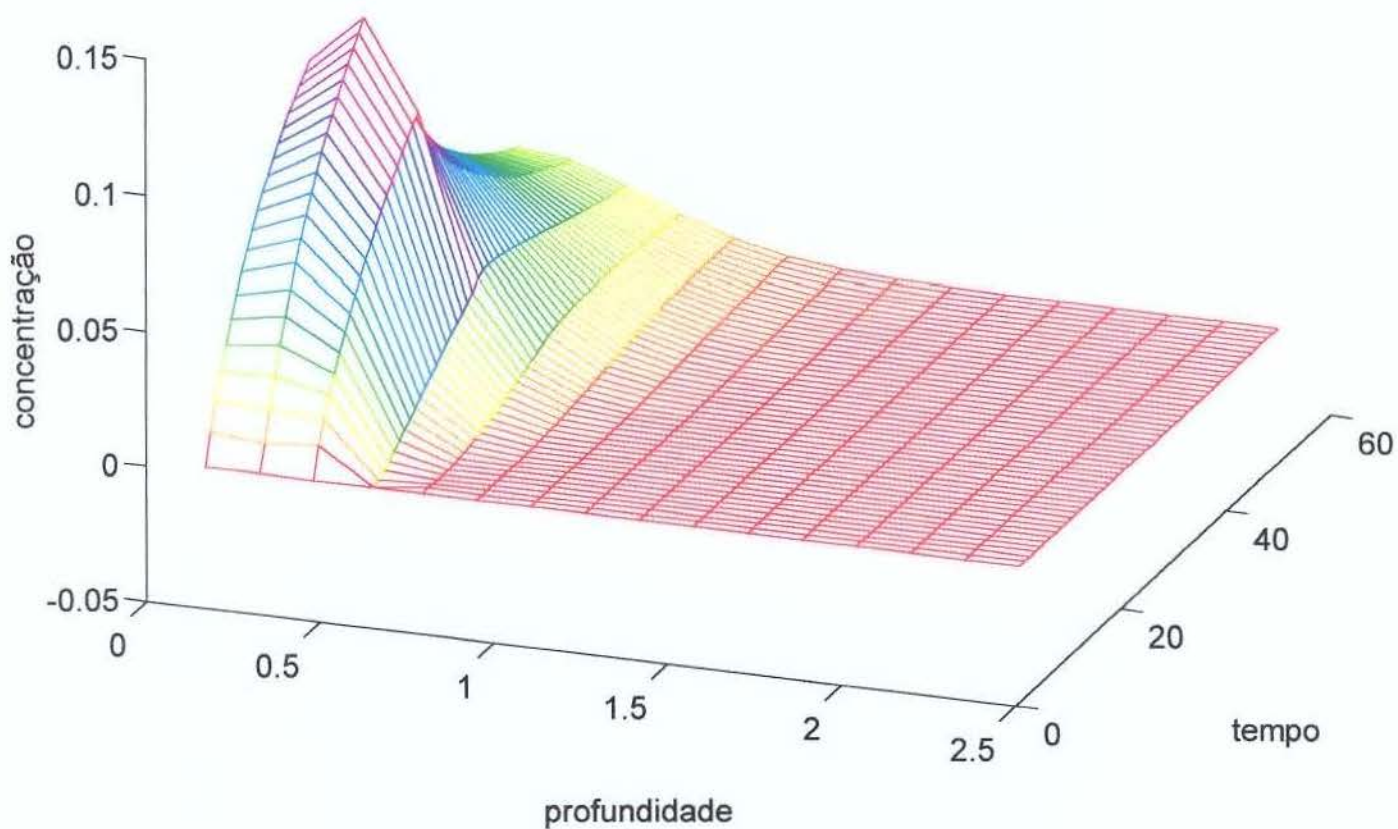


Perceba-se como neste caso o fenômeno difusivo é menos acentuado próximo à superfície.

A seguir, um fenômeno com a presença de um termo advectivo. A EDP em (19) passa a ser :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \cdot \text{div}(C) - \sigma C + f, \text{ em } (0, h) \times (0, \tau]$$

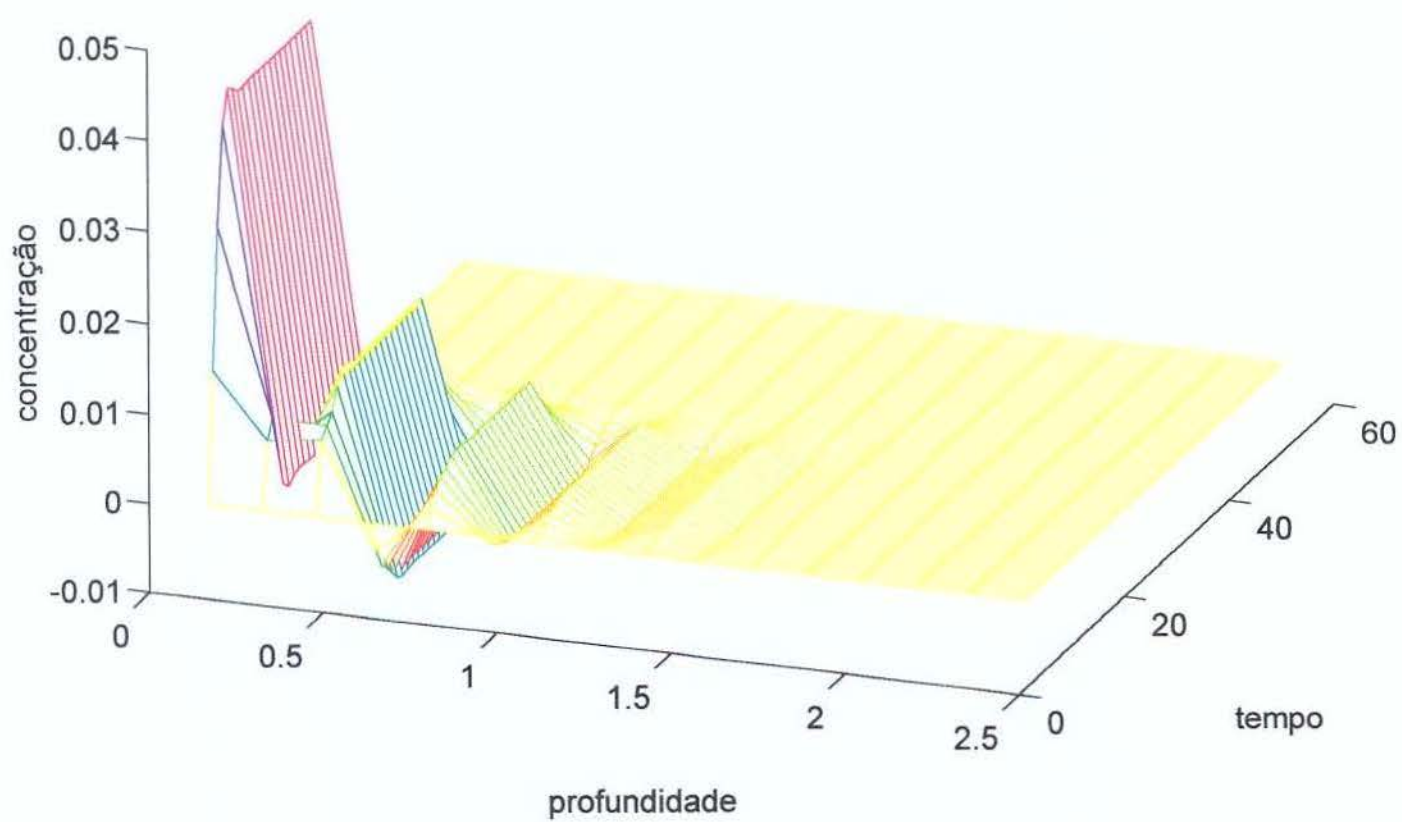
Figura 3 : Evolução difusiva advectiva na coluna c/ velocidade p/ baixo



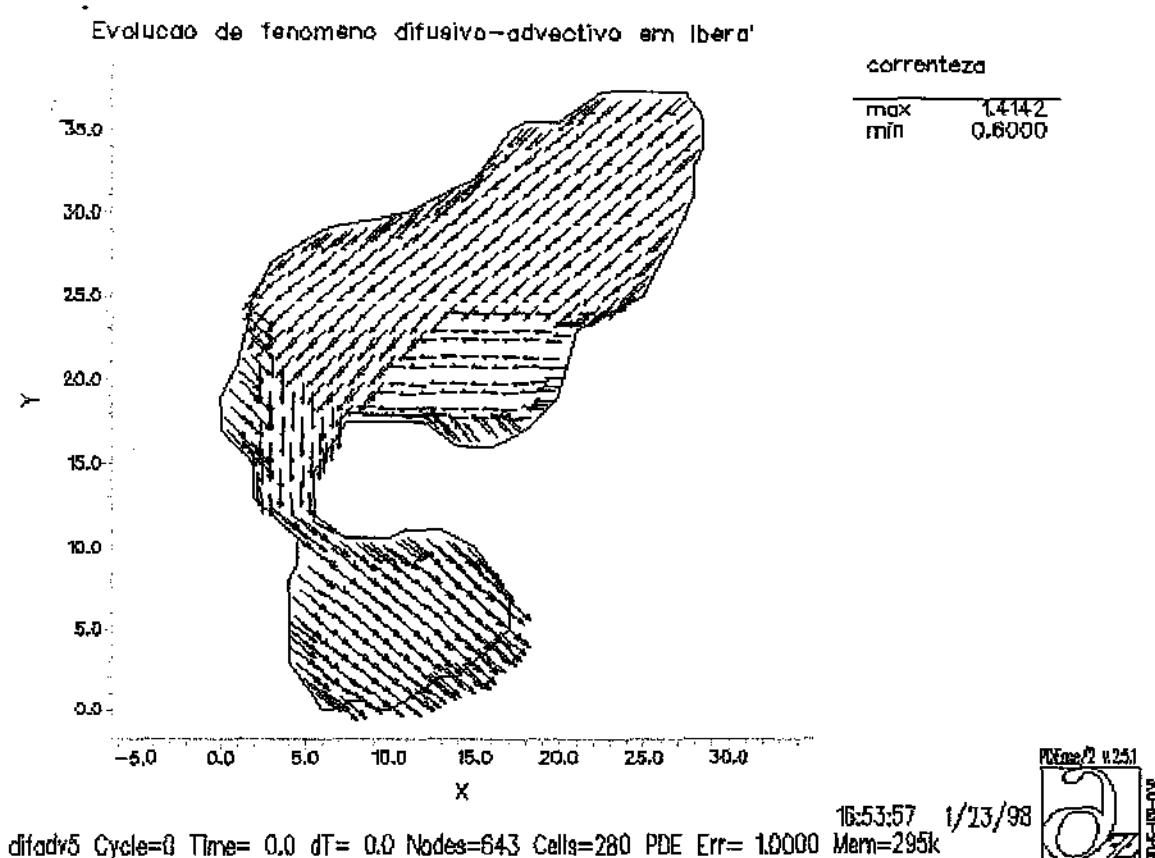
A presença deste termo acentua levemente a concentração do poluente em direção ao fundo a medida que o tempo passa. Tanto neste caso como no anterior a brusca mudança na concentração é devido a uma chuva que pára, após certo momento.

A próxima figura (4) exemplifica o comprometimento da solução quando a condição de Peclet não é satisfeita.

Figura 4 : Oscilação Numérica, No. de Peclet = 9.308 > 2



A seguir são apresentados, em termos de duas variáveis espaciais, os resultados da simulação numérica para difusão do poluente na superfície da lagoa Iberá. O desenho da lagoa corresponde ao do *mapa geológico de la Provincia de Corrientes* [], discretizado com uso do *PDEase®*. Foi feito um modelo de circulação (abaixo) para a lagoa baseado na nossa intuição¹ e no fato de que há uma leve corrente do nordeste da lagoa no sentido dos Esteros do rio Mirinhay, localizados ao sul e ligando a lagoa ao rio.



Consideramos as velocidades (de Stokes) constantes sobre diferente trechos da lagoa, respeitando um critério arbitrário de elas serem maiores quanto mais próximas do Mirinhay e de que se dirige genericamente a sudoeste, em direção ao rio Mirinhay.

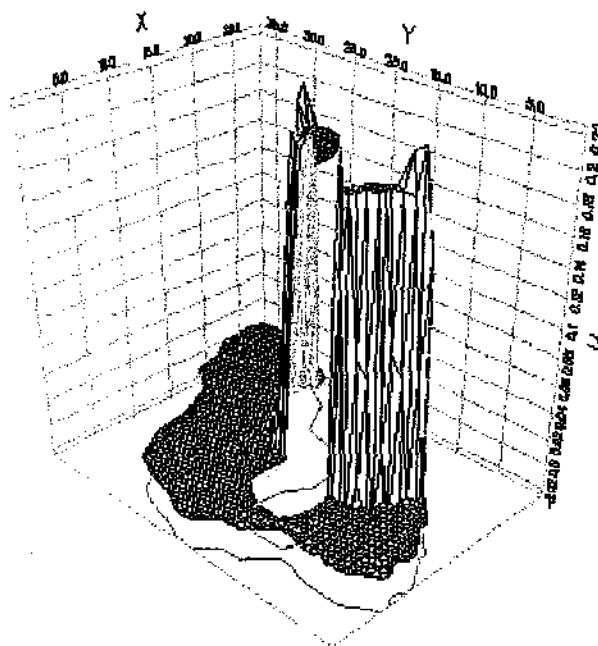
A discretização da lagoa é mesmo aquela exibida no capítulo III, com 643 nós e 280 células. Fizemos 24 iterações no tempo, e exibimos as curvas de nível da

¹ Diversos contatos com a Universidade del Salvador (Buenos Aires e Gob. Virasoro) e a Fundación Iberá não renderam informação alguma sobre modelos de circulação para este ou outros corpos aquáticos na região.

concentração do poluente, de duas em duas, 12 delas. Mostraremos também a concentração (em três dimensões) inicial e final do poluente sobre a lagoa.

Localizamos a concentração inicial do poluente numa parte (leste) da lagoa, pela maior proximidade com as plantações de arroz e outros grãos. Consideramos $f = 0$, ou seja, no instante em que começa a simulação não há mais presença de fonte, cuja ação foi responsável pela concentração inicial.

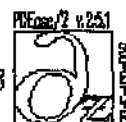
Evolução de fenômeno difusivo-advectivo em 1D



$$\frac{U}{Vol} = 9.613428$$

difadv5 Cycle=0 Time= 0.0 dT= 0.0 Nades=643 Cells=280 PDE Err= 1.0000 Mem=295k

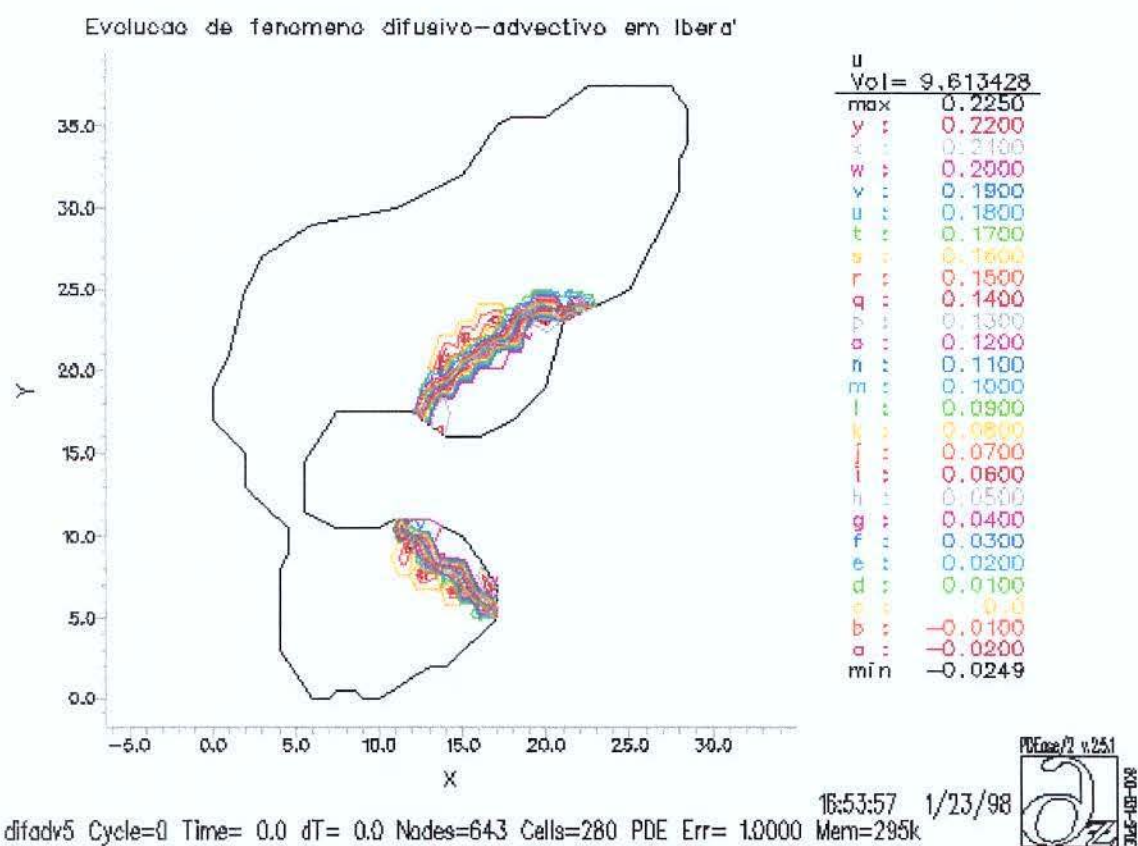
16:53:57 1/23/98



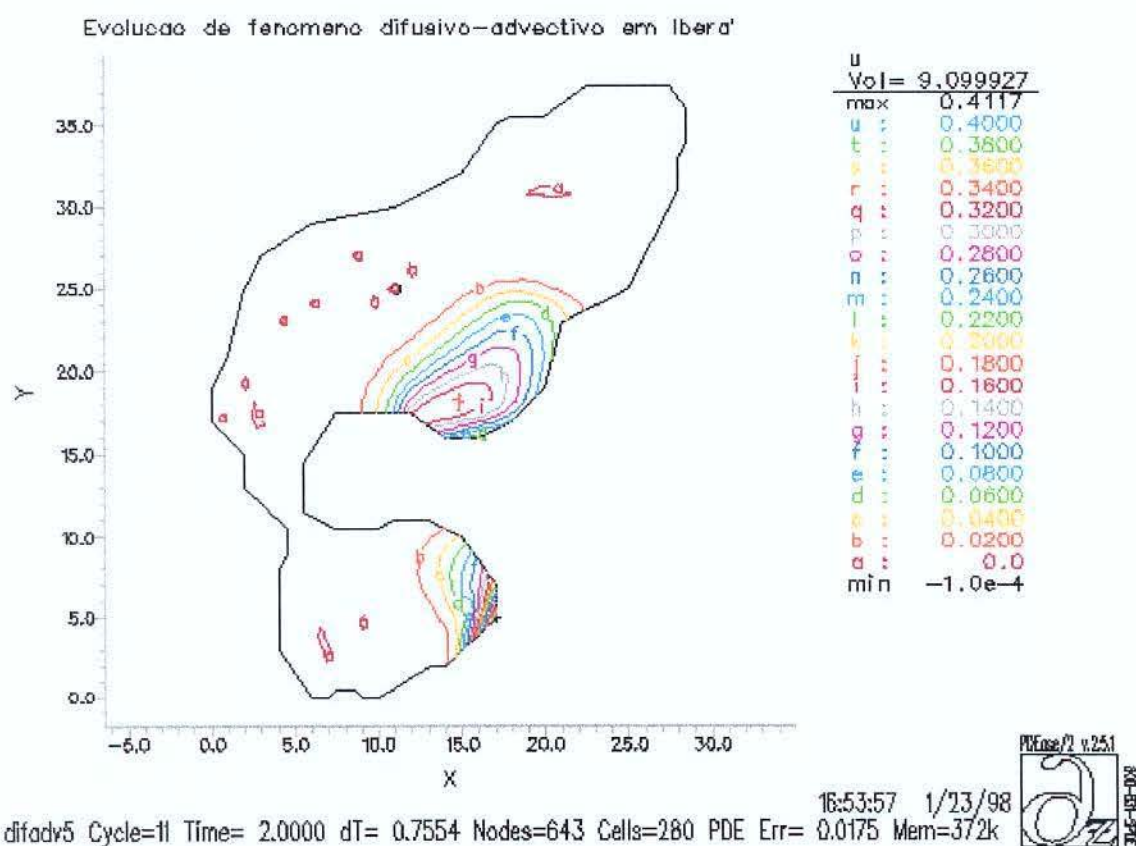
Como se vê, esta situação inicial é do tipo *step function*, e uma descrição sua como sendo $L^2(\Omega)$ é bastante razoável.

A seguir teremos uma seqüência de gráficos mostrando a evolução das soluções aproximadas do fenômeno. Optamos por exibir a concentração com curvas de nível por ser menos confusa visualmente. Perceba-se que o erro estimado de fato diminui a cada iteração.

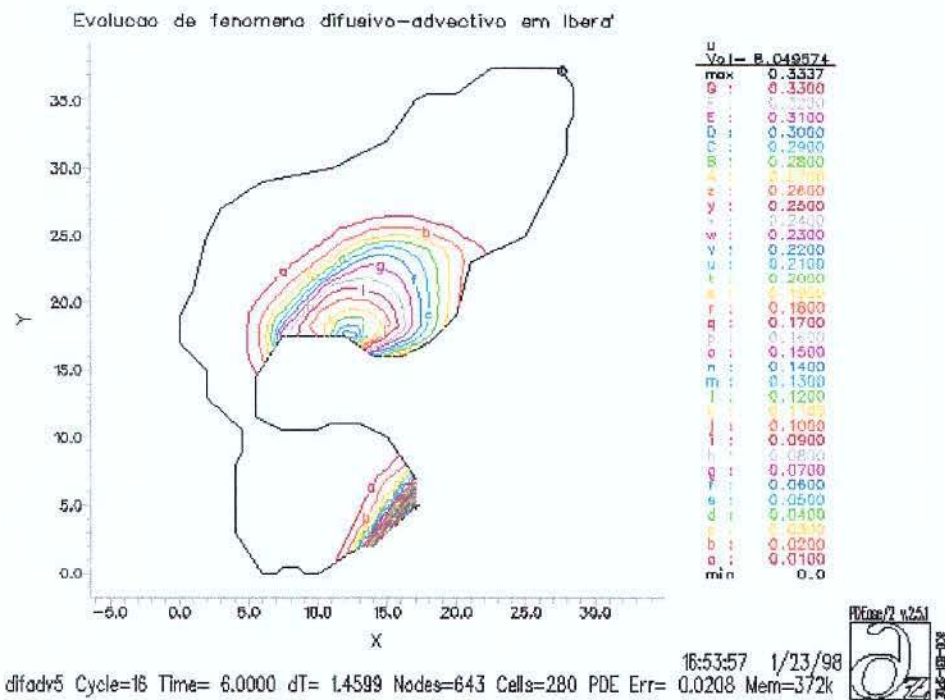
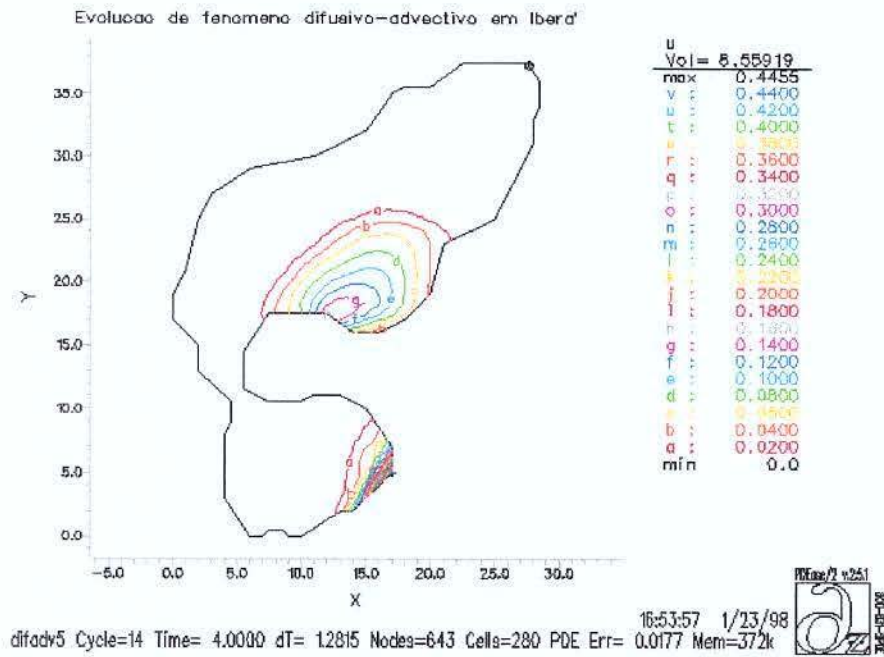
Abaixo, as curvas de nível da concentração inicial ($T = 0$).



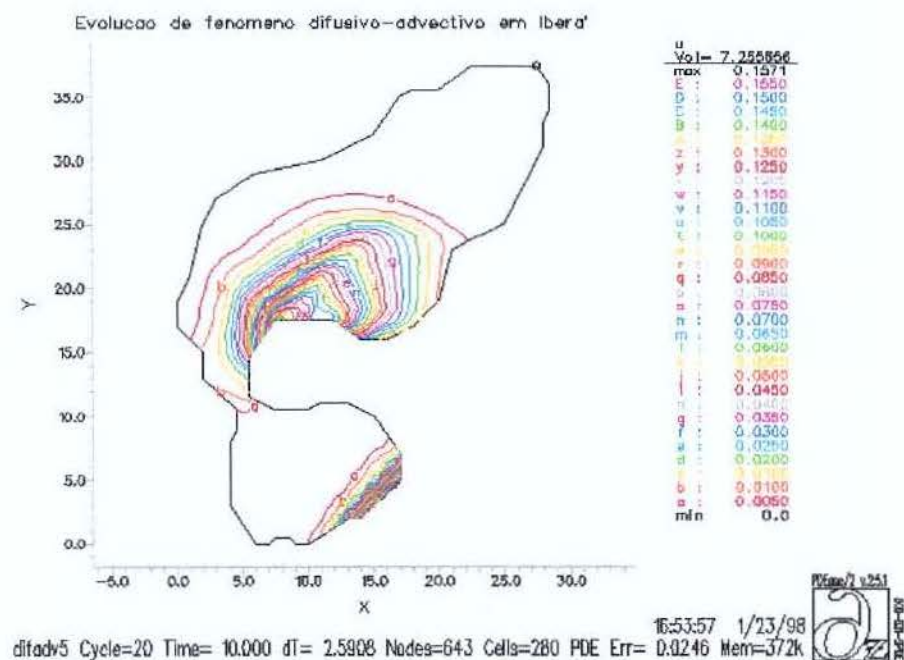
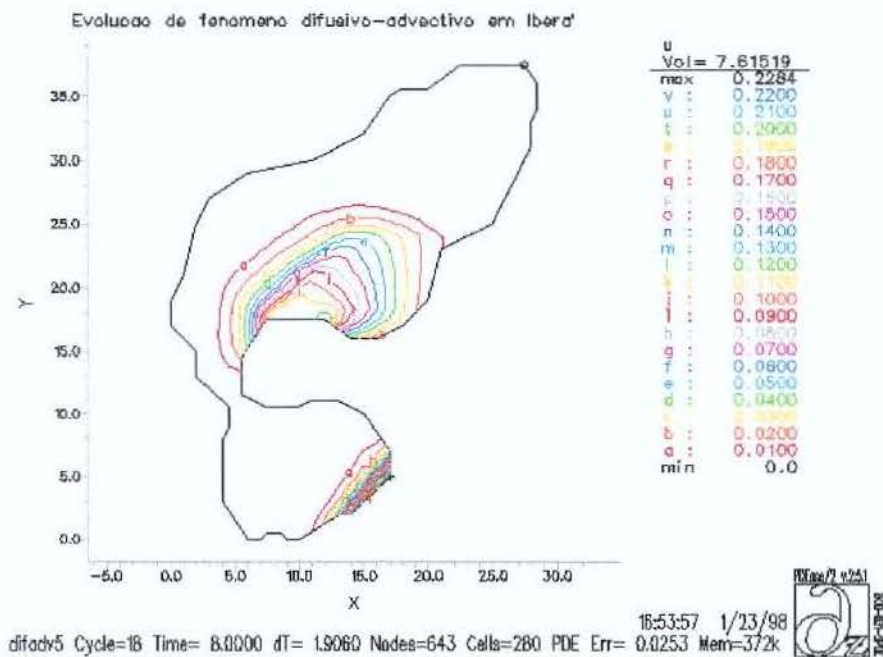
Segunda iteração temporal ($T = 2$). Os pequenos nódulos espalhados na lagoa devem-se oscilações numéricas.



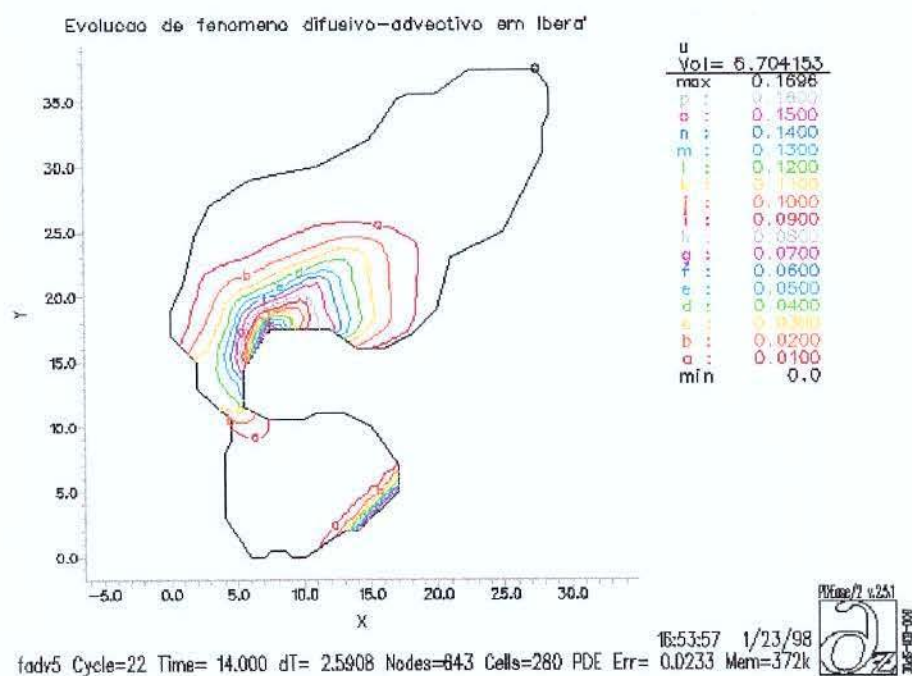
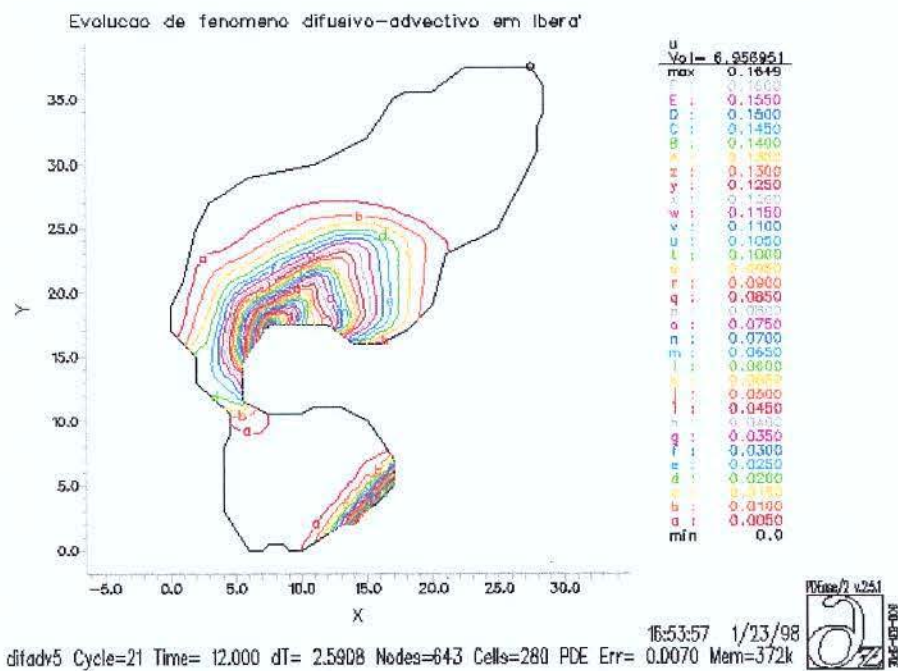
Quarta e Sexta iterações (respectivamente, $T = 4$ e $T = 6$):



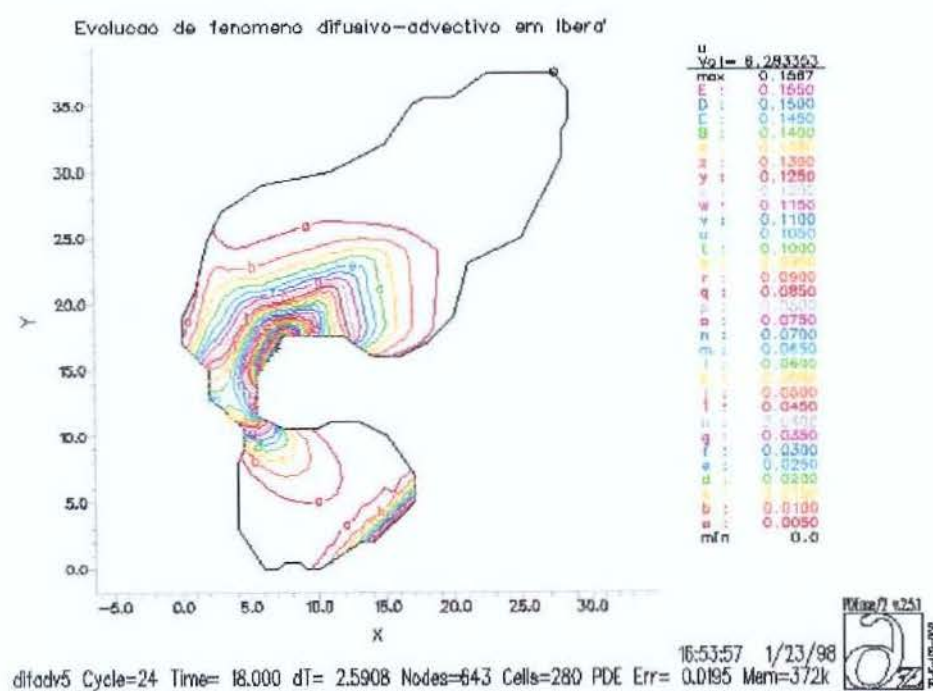
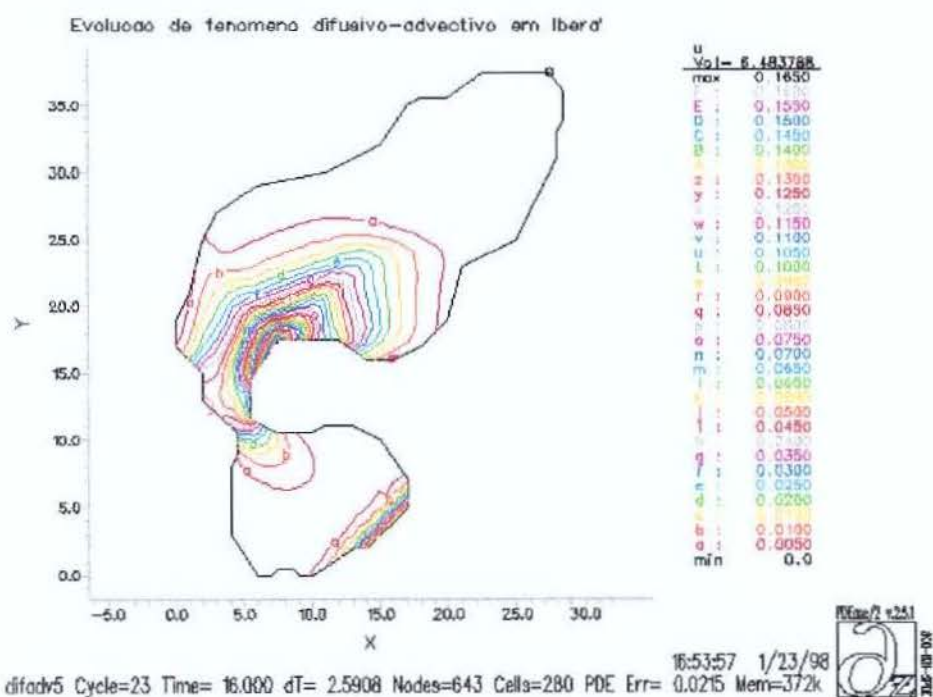
Oitava ($T = 8$) e décima iterações ($T = 10$) :



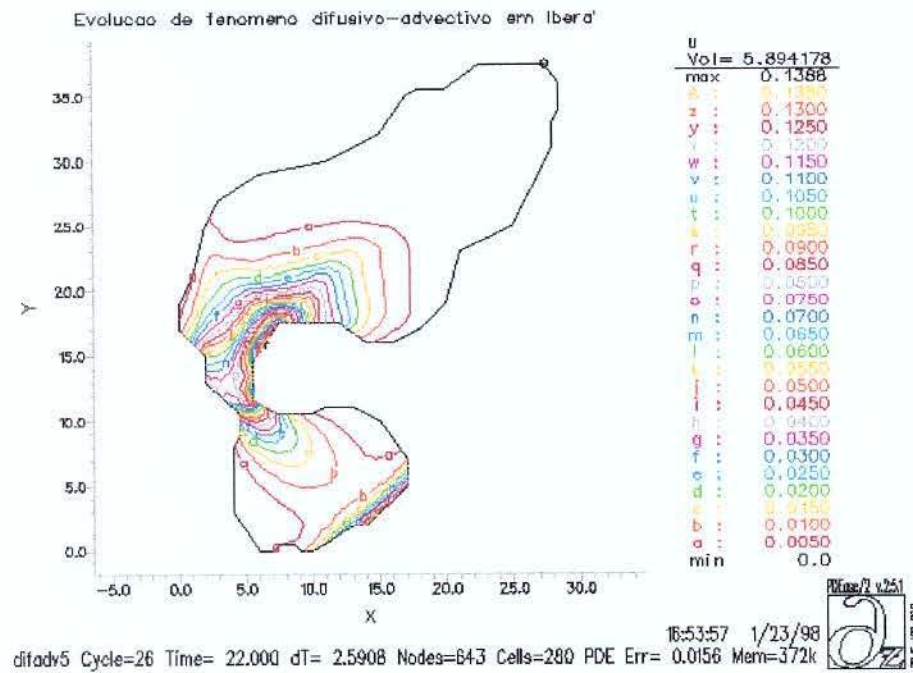
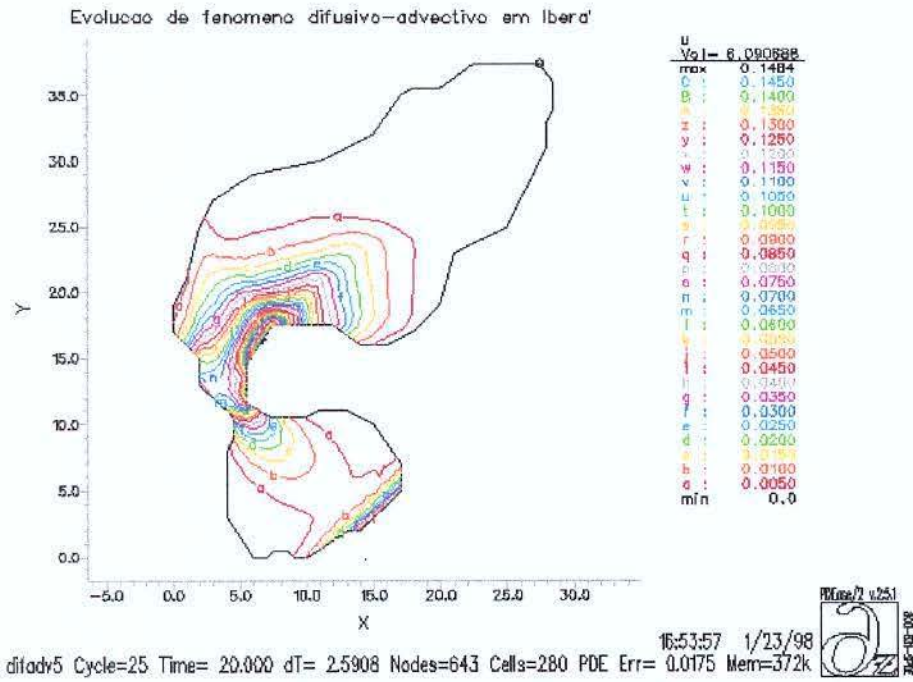
Décima Segunda ($T = 12$) e décima quarta ($T = 14$) iterações :



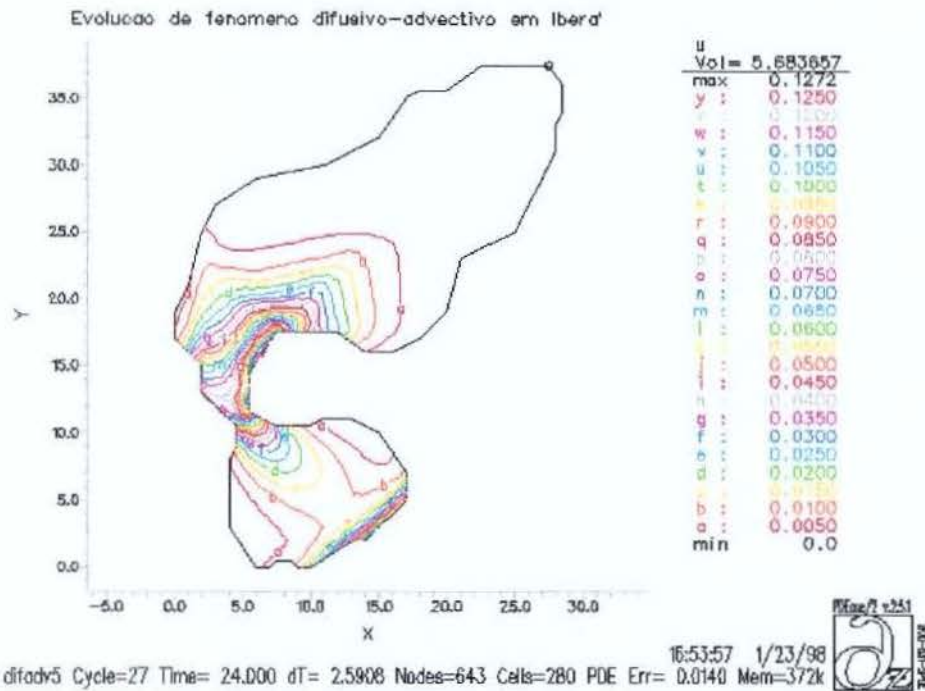
Décima Sexta ($T = 16$) e décima oitava ($T = 18$) iterações :



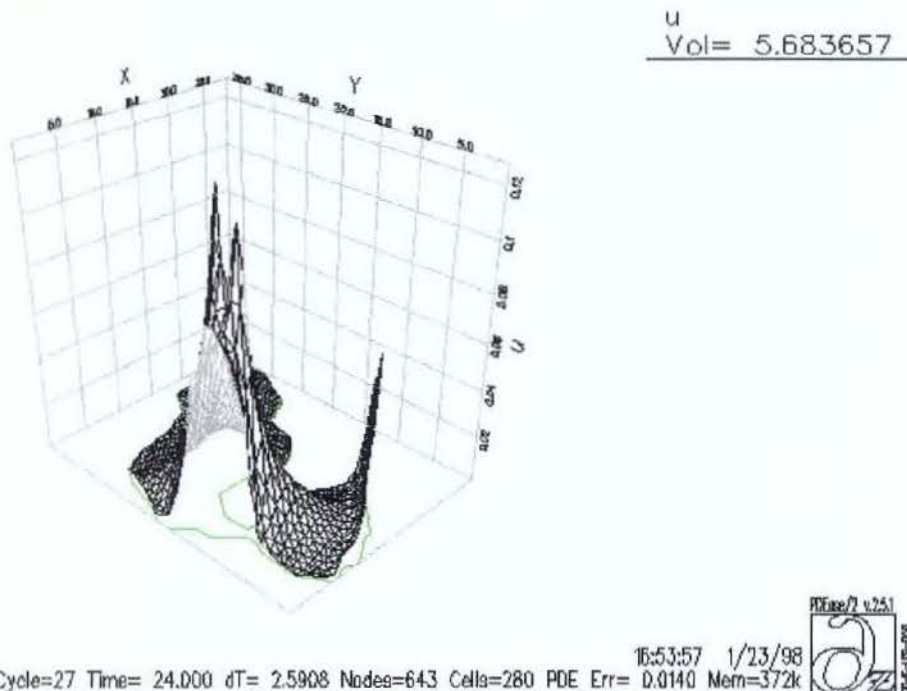
Vigésima ($T = 20$) e vigésima segunda ($T = 22$) iterações :



Concentração “final” (para $T = 24$, exibimos as curvas de nível e em três dimensões) :



Evolução de fenômeno difusivo-advectivo em Iberá'



No *PDEase* os sistemas lineares são resolvidos pelo método dos gradientes conjugados. O erro é calculado em cada triângulo, o que permite que o refinamento da malha seja feito apenas naqueles triângulos cujo erro é grosseiro. Além disso, para problemas evolutivos (como este), a resolução dos sistemas resultantes da discretização temporal é feita utilizando-se estágios intermediários, isso tudo resultando em aceleração do método e diminuição do erro (cf. [26]).

Dos resultados exibidos pode-se perceber que o poluente se movimenta numa direção preferencial, exatamente aquela que foi definida pelo nosso suposto modelo de circulação. A diminuição do volume de poluente sobre a superfície da lagoa é devido à taxa de perda de massa, σC , e também devido ao fluxo da lagoa para o rio Mirinhay.

O comportamento desta simulação nos deixa otimistas quanto a sua futura utilização, assim que estivermos de posse dos dados e parâmetros reais, vindos da Argentina. Pela praticidade no uso do *PDEase*®, é muito simples trocar os parâmetros acadêmicos pelos reais. É claro, deve-se salientar que, dependendo do valor destes parâmetros, será necessário um maior refinamento da discretização espacial de modo a tornar a resolução mais precisa do ponto de vista computacional. Daí poderemos apresentar um modelo viável do ponto de vista computacional e aceitável do ponto de vista ambiental.

Considerações Finais

Não podemos deixar de dizer que a nossa tentativa de trabalhar no projeto Iberá tem sido, até agora, um tanto frustrante. Todo projeto depende de financiamento, e às vezes, acaba ficando prejudicado pelo atraso neste setor. Aqui no Brasil a comunidade científica conhece bem estas limitações, visto que os órgãos de fomento à pesquisa são poucos e com recursos escassos. É pena, do ponto de vista ambiental e social que um projeto deste porte, envolvendo a comunidade internacional, tenha desacelerado mediante estas dificuldades, dada a gravidade e interesse da situação. Nós também lamentamos, pois seria muito mais rico nosso trabalho se pudéssemos nos aproximar ainda mais da situação real. Mas por uma questão de prazos (conclusão do mestrado, bolsa, ...) não há como esperarmos que o projeto ganhe mais consistência para podermos nos engajar nele. Esta tese é apenas um passo inicial. Esperamos que com o desenrolar das pesquisas sobre o macrossistema Iberá, possamos adequar nosso trabalho àquela realidade. Esta tem sido desde início a nossa postura : colaborar no que for possível.

Dentro desta perspectiva, nosso modelo e simulação sinalizam claramente no sentido da possibilidade de que a situação se torne grave (ou de que já seja grave e ainda não o saibamos). Os *arroceros* e *granaderos* que concentram suas atividades a leste dos Esteros de Iberá podem imaginar que a proteção de suas plantações das atividades de patos e outras pragas é primordial, e que o uso de repelentes tóxicos tem efeito apenas local, mas não se pode esquecer que uma vez presentes na atmosfera estes produtos podem se difundir a distâncias bem maiores do que imaginam (Palomino [25] mostra bem isto). Neste trabalho pode-se perceber que uma vez presentes na lagoa os poluentes são uma ameaça não só a flora e fauna da própria lagoa, mas em função do desaguamento nos esteros, e posteriormente no rio Mirinhay, a comunidades que vivem à beira e, muitas vezes, em função do rio (o rio Mirinhay atravessa diversos vilarejos e deságua no rio Uruguai) também são ameaçadas.

Muitos dos trabalhos do grupo de Biomatemática do Imecc-Unicamp tratam de modelos evolutivo-difusivo-advectivos. Diferem no estudo de caso, algo que sempre enriquece a discussão em todos os níveis, inclusive matemática, já que devemos a estes diferentes casos, os diversos modelos, equações, condições de fronteira, métodos, etc.

Aqui, além de colocar o caso Iberá, tentamos fazer uma apresentação diferenciada, pensando em leitores que não sejam matemáticos ou que ainda sejam iniciantes. Assim, a preocupação não foi o rigor nas definições e demonstrações (às vezes apresentadas de maneira bem pouco formais).

Que não se pense que esta postura é didática, mas filosófica. Talvez até este aspecto tenha sido um pouco exagerado, mas não poderia passar em branco esta oportunidade de colocar a questão explicitamente, ao invés de deixá-la subjacente à leitura do texto. A postura filosófica deste trabalho¹ nasceu, aos poucos, com o encontro com o teorema de Gödel (na verdade não com o teorema em si, mas com seu legado). No final do século passado e início deste, muito esforço foi feito para uma axiomatização completa do pensamento matemático, de modo que o conjunto das idéias matemáticas fosse consistente, no sentido de que não carregasse em si qualquer possibilidade de contradição interna.

“O artigo de Gödel mostrou que tal pressuposição é insustentável. Ele colocou os matemáticos diante da espantosa e melancólica conclusão de que o método axiomático tem certas limitações inerentes que eliminam a possibilidade de que mesmo a aritmética comum dos inteiros possa ser plenamente axiomatizada. Mais ainda, ele provou que é impossível estabelecer a consistência lógica interna de uma amplíssima classe de sistemas dedutivos – aritmética elementar, por exemplo – a menos que adotemos princípios de raciocínio tão complexos que sua consistência interna fica tão aberta à dúvida quanto a dos próprios sistemas. À luz destas conclusões, é inatingível qualquer sistematização final de numerosas áreas importantes da matemática e é impossível dar garantia absolutamente impecável de que muitos ramos da matemática estejam inteiramente livres de contradição interna”².

¹ Deste autor, melhor dizendo.

² Nagel & Newman [24]. O livro é um comentário bem legível sobre o teorema de Gödel.

Isto não significa que a matemática deve ser abandonada dada esta “fragilidade”. Imagine-se o que perderíamos se queimássemos todos os quadros de Picasso, por serem “contraditórios”³ ! Significa sim, que deve ser levada a sério como qualquer outra maneira de encarar e descrever a realidade⁴. Afinal, é possível provar que Noé construiu uma grande arca, e dentro dela colocou um casal de cada animal sobre a Terra, para salvar toda a vida do dilúvio ? Dentro do pensamento religioso hebraico-cristão, a resposta é sim, já que o relato está no livro sagrado (e não interessa se este livro está repleto de contradições). Assim, se se acredita na descrição matemática como adequada para certos objetos ou fenômenos, então pouco importa que ela não esteja livre de contradições internas.

“A conclusão geral que emerge destes estudos críticos dos fundamentos da matemática é que a vetusta concepção da matemática como a ‘ciência da quantidade’ é tanto inadequada como desencaminhadora. Pois, evidencia-se que a matemática é simplesmente a disciplina *por excelência* que tira conclusões logicamente implicadas em qualquer conjunto de axiomas ou postulados. De fato, veio a ser reconhecido que a validade de uma inferência matemática não depende em sentido algum de qualquer significado especial que se possa associar aos termos ou expressões contidos nos postulados. A matemática foi assim reconhecida como sendo muito mais abstrata e formal do que se supunha tradicionalmente; mais abstrata porque juízos matemáticos podem ser estabelecidos em princípio sobre o que quer que seja mais do que sobre algum conjunto de objetos ou traços de objetos inerentemente circunscrito; e mais formalmente, porque a validade das demonstrações matemáticas se estriba na natureza de juízos, mais do que na natureza de um assunto particular. Os postulados de qualquer ramo da matemática demonstrativa não se referem inerentemente a espaço, quantidade, maçãs, ângulos ou orçamentos; e qualquer significado especial que pode estar associado com os termos (ou ‘predicados descritivos’) nos postulados não desempenha papel essencial no processo da derivação de teoremas. Repetimos que o problema com o qual o matemático puro se defronta (diferentemente do cientista que emprega a matemática ao investigar um assunto especial) não é se os postulados por ele assumidos ou as conclusões que deles deduz são verdadeiros, mas se as alegadas conclusões são de fato *consequências lógicas necessárias* das pressuposições iniciais”⁵.

³ Enfim, em algum sentido. Não deve ser encarado como crítica de arte.

⁴ Realidade ?

⁵ Nagel & Newman [24].

Não queremos assim, dispensar este instrumento (poderoso se utilizado de modo adequado), mas estamos muito longe também de nos preocuparmos somente com o instrumento. Matemática é uma linguagem⁶, e como linguagem, conta uma história. É claro, que quanto mais sofisticada uma linguagem, mais precisa ela pode resultar na descrição de objetos, e isto justifica todo o empenho da pesquisa em matemática dita pura. Mas isto não é uma regra, e se temos uma linguagem que já é tão rica, porque não utilizá-la, mesmo que de maneira “inocente”, na resolução de problemas ? O trabalho com matemática aplicada completa aquele. De que adiantaria tanta matemática, se ela fosse tão desassociada da realidade que não descrevesse qualquer coisa ?

“Santinha nunca foi para mim o diminutivo de Santa.

Nem Santa nunca foi para mim a mulher sem pecado.

Santinha eram dois olhos míopes, quatro incisivos claros à flor da boca.

Era a intuição rápida, o medo de tudo, um certo modo de dizer

‘Meu Deus, valei-me’ ”.

(Manuel Bandeira, “Os Nomes”)

⁶ Isto é uma posição pessoal.

VI

Referências

- [1] Beccacegi, M. : "El Refugio Ideal", Fotocópia não identificada.
- [2] Becker, E. B.; Carey, G. F. & Oden, J. T. : "Finite Elements : An Introduction", Vol.1, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, 1981.
- [3] Brézis, H. : "Analyse Fonctionnelle : Théorie et Applications", Masson, Paris, 1983.
- [4] Brooks, A. N. & Hughes, T. J. R. : Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations". Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, nº 32, 199-259, 1982, North-Holland Publishing Co.
- [5] Carey, G. F. & Oden, J. T. : "Finite Elements : A Second Course"., Vol. 2, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, 1983.
- [6] Carey, G. F. & Oden, J. T. : "Finite Elements : Mathematical Aspects"., Vol. 4, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, 1983.
- [7] Conte, S. D. & DeBoor, C. : "Elementary Numerical Analysis : An Algorithmic Approach", McGraw-Hill, 1981.
- [8] Cunha, C. : "Métodos Numéricos para as Engenharias e Ciências Aplicadas", Ed. Unicamp, 1993.
- [9] Edelstein-Keshet, L. : "Mathematical Models in Biology". Random House/Birkhauser, 1987.
- [10] "Esteros del Iberá, the Sustainable Management of Wetland Resources". Não publicado.
- [11] "Estudio del Macrossistema Iberá : Tomo V. Ecología", Vol.1, 1ª Parte, Instituto Correntino del Agua & Instituto Nacional de Ciencia y Técnica Hídricas – Centro regional Litoral, 1981.
- [12] Foucault, M. : "Isto não é um Cachimbo", Paz & Terra, 1989.
- [13] Freedman, B. : "Environmental Ecology : The Ecological Effects of Pollution, Disturbance and Other Stresses", Academic Press, 1995.
- [14] Kardestuncer, H. : "Finite Element Handbook", McGraw-Hill, 1987.

[15] Kreyszig, E. : "Introductory Functional Analysis With Applications", John Wiley, 1989.

[16] Lima, E. L. : "Curso de Análise vol.1", Impa, 1989.

[17] Lions, J. L. : "Équations Différentielles Opérationelles", Springer, Berlim, 1961.

[18] "Mapa Geológico de la Provincia de Corrientes", Secretaría de Minería, Dirección Nacional del Servicio Geológico, 1995.

[19] Marchuk, G. I. : "Mathematical Models in Environmental Problems", North-Holland, Amsterdam, 1986.

[20] Medeiros, L. A. J. & Malta, S. : "Introdução às Equações Diferenciais Parciais", 1ª Escola de Verão em Computação Científica, LNCC, Rio de Janeiro, 1996.

[21] Medeiros, L. A. J. & Miranda, M. M. : "Introdução aos Espaços de Sobolev e às Equações Diferenciais Parciais", Notas de Aula, UFRJ, 1989.

[22] Mistro, D. C. : "O Problema da Poluição em Rios por Mercúrio Metálico : Modelagem e Simulação Numérica", Dissertação de Mestrado, Imecc-Unicamp, 1992.

[23] Murray, J. D. : "Mathematical Biology", Springer, Berlin, 1989.

[24] Nagel, E. & Newman, J. R. : "Prova de Gödel", Ed. Perspectiva, São Paulo, 1973.

[25] Palomino, C. S. : "Modelagem Matemática e Aproximação Numérica do Estudo de Poluentes do Ar", Dissertação de Mestrado, Imecc-Unicamp, 1993.

[26] "PDEase2® : Finite Element Analysis for Partial Differential Equations : Start-Up and Installation Guide for Personal Computers Running MS-DOS or Windows", SPDE, 1995.

[27] Sandison, H. : "Pantanal : As Águas da Vida", Produtora Imagenes, Montevideu, (programa exibido pela TV Cultura, 1997).

[28] Watkins, D. S. : "Fundamentals of Matrix Computations", John Wiley & Sons, 1991.