

Um Modelo para a Dispersão de Poluentes em Áreas Alagáveis

G. L. Diniz*

Mat-ICET, UFMT - Cuiabá, MT.

J. F. R. Fernandes†

Densis-FEEC, UNICAMP - Campinas, SP.

J. F. C. A. Meyer‡

DMA-IMEEC, UNICAMP - Campinas, SP.

Resumo

Neste estudo, é descrito um problema de poluição ambiental por produtos impactantes numa região de pantanal. É apresentado um modelo matemático descritivo, justificado pelos usos prévios em função dos fenômenos físicos considerados. É verificada a existência de uma solução no sentido fraco e são propostos métodos numéricos de aproximação.

Palavras-chave: *Poluição em alagados, Dispersão de poluentes, Modelagem matemática.*

1 Introdução

O estudo da dispersão de poluentes, através da modelagem matemática, tem se mostrado bastante eficiente para o estudo de perturbações globais ou mesmo de ecossistemas em particular. Neste sentido, é que se propõe o presente estudo do problema da dispersão de poluentes em regiões de áreas alagáveis, onde o processo de dispersão ocorre em meios distintos como o ar e a água.

*dinizgl@densis.fee.unicamp.br

†jura@densis.fee.unicamp.br

‡joni@ime.unicamp.br

Nas três últimas décadas, a emissão de poluentes industriais no meio ambiente levou a distúrbios do equilíbrio de vários ecossistemas, como a erosão e a contaminação de extensas áreas por metais ferrosos e não-ferrosos, além de outros minerais (Marchuk, 1986).

Isto trouxe a necessidade de estudos e monitoramento dos problemas ambientais, abrindo um promissor campo de trabalho para pesquisadores das mais variadas áreas. Uma vez que as questões ambientais estão fortemente interrelacionadas, não podendo ser tratadas de modo isolado para a busca de soluções viáveis, ou até mesmo satisfatórias.

Desta forma, a proteção ambiental vem ganhando cada vez mais um papel relevante no cenário mundial, principalmente nesta última década, tendo como marco a realização da Conferência Mundial ocorrida no Rio de Janeiro em 1992, a chamada Rio-92.

Se, por um lado, tais estudos ganharam maior destaque pelos órgãos governamentais somente nesta última década, por outro, no meio científico isso já vinha ocorrendo desde a década de 70, como por exemplo, a realização em 1970 do International Environmental Protection Symposium, realizado na antiga Tchecoslováquia e os seguintes com a ampla participação de pesquisadores (Marchuk, 1986).

Em muitas situações, tem acontecido regiões de exploração agro-industrial próximas de áreas de proteção ambiental. Barreiras isoladoras podem ser estabelecidas em terra, de discutível eficiência. No caso de meios aquáticos e aéreos, as barreiras se tornam muito mais difíceis, se não impossíveis.

Assim, poluentes transportados advectivamente viajam invadindo regiões que deveriam ser protegidas das atividades antrópicas. É o caso, por exemplo, de deriva de agroquímicos em lagoas próximas às regiões de plantio, ou das cinzas provenientes de queimadas afetando lagoas e baías, como ocorre, por exemplo, na parte norte do Pantanal Mato-grossense, incluindo, também, o estudo da pulverização por avião de áreas de plantio, vizinhas às áreas alagáveis.

Um estudo integrado do impacto sobre regiões a serem preservadas, próximas a atividades agro-industriais, irá exigir uma modelagem integrada do problema englobando tanto o meio aéreo quanto o aquático, e é o que está se propondo através dos modelos matemáticos apresentados mais adiante.

2 Alguns aspectos da poluição

Na realidade, nosso planeta está repleto de substâncias tóxicas. Muitas delas ocorrem de maneira natural, completamente independentes de qualquer atividade antropogênica, como por exemplo, o vapor de um vulcão em atividade pode conter uma quantidade suficientemente grande de enxofre que não permita o crescimento de plantas nas suas proximidades. Os rios que fluem através das florestas podem tornar-se desoxigenados devido às substâncias orgânicas naturais neles depositadas, as quais ao se decompor, resultam em contaminações semelhantes àquelas causadas pelos esgotos domésticos. O mercúrio, que existe naturalmente nos oceanos, pode vir a se concentrar nos peixes em níveis que chegariam a alarmar as autoridades de saúde pública (Mellanby, 1982).

No entanto, quando falamos de poluição, geralmente nos referimos à presença de substâncias tóxicas introduzidas pelo homem no meio ambiente. Isto não quer dizer que apenas a poluição causada pelo homem seja nociva, embora muitos de seus atos tenham, freqüentemente, conseqüências mais dramáticas, do que os lentos efeitos dos envenenamentos de origem natural.

Os poluentes persistentes, hoje em dia freqüentemente chamados de “não-biodegradáveis”, mais pela precisão do termo do que por sua elegância, colocam-se como um problema completamente diferente. Quando diluídos a um grau inofensivo, eles podem permanecer no nosso meio ambiente, porém com a possibilidade de serem concentrados, possivelmente por organismos vivos. Além disto, alguns produtos químicos mais persistentes permanecem inalterados indefinidamente, ou têm mudanças extremamente lentas.

Por essas razões, é relevante e válido o temor de que substâncias químicas produzidas pelo homem venham causar poluição global relativamente permanentemente. Embora para alguns isto poderia ser considerado como um exagero, pesquisas recentes*, no entanto, têm demonstrado o nível preocupante a que se chegou.

Em relatório recente (CDC Environ.Health, 2001), o CDC (Centro de Controle e Prevenção de Doenças dos Estados Unidos) divulgou um grave relatório tóxico sobre a exposição humana aos produtos químicos ambientais.

Um estudo recente da Academia Nacional de Ciência dos Estados Unidos (National Research Council/USA, 2000), indica que em cada quatro problemas que afetam o desenvolvimento e comportamento das crianças hoje, um

*vide (Rebouças, 1997)

pode estar relacionado a fatores genéticos e ambientais, incluindo compostos neurotóxicos como chumbo e pesticidas com organofosfatos.

3 O Problema

Para se ter uma primeira noção do processo de transporte e transformação dos poluentes no meio ambiente, apresentamos a figura 1 a seguir. Este processo está relacionado com:

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

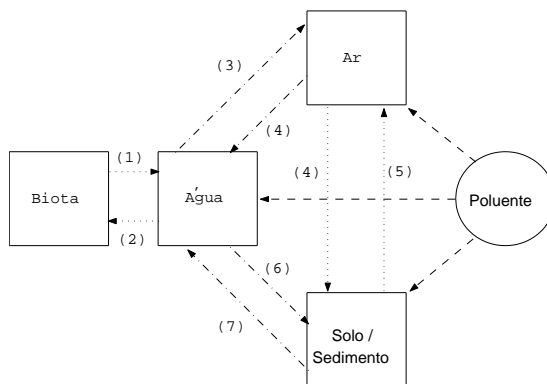


Figura 1: Processo de transporte e transformação do poluente

(1) Excreção/Secreção; (2) Bioacumulação; (3) Evaporação;
(4) Precipitação; (5) Volatilização; (6) Absorção e (7) Diluição -
adaptado de (Connel e Miller, 1984)

Em geral, o tratamento do problema da poluição tem sido considerado somente de modo isolado em cada um dos compartimentos indicados na figura 1, isto é, no ar ou na água ou nos solos/sedimentos ou na biota, sendo que a ênfase depende da área de interesse do pesquisador que está realizando tal modelagem ou estudo.

Neste sentido, o presente trabalho procura levar em consideração, senão de forma completa, pelo menos boa parte dos processos indicados pelo diagrama da figura 1.

Dentre os agroquímicos em geral, será dedicada mais atenção aos pesticidas, devido ao seu alto teor tóxico, o que implica num impacto maior na qualidade ambiental, sobretudo para a biota.

O uso de pesticidas na agricultura tem possibilitado ao agricultor a produção de alimentos a um custo menor. Assim como os fertilizantes, os pesticidas têm substituído a mão-de-obra e os equipamentos, no trato com a lavoura para o controle de pragas. Primariamente, têm sua aplicação na produção de grãos e de algodão, sendo também empregados nos campos de cultivo de hortaliças e frutíferas em geral (Loehr, 1984).

A produção e aplicação de pesticidas, em larga escala, começou por volta dos anos 40, aumentando gradativamente até a década de 70, quando o uso de fungicidas e inseticidas diminuiu, devido a restrições ambientais, enquanto o uso dos herbicidas continuou a crescer (Loehr, 1984).

Uma propriedade importante dos pesticidas é a *solubilidade*, uma característica intrínseca da substância química que nos indica a facilidade com que ela se mistura ao meio líquido, formando um sistema homogêneo (Thibodeaux, 1979), tal propriedade é um dos fatores determinantes no transporte de poluentes no ambiente aquático (Haque et al., 1980).

Quanto à solubilidade no ambiente aquático, de uma maneira geral, podemos classificar os pesticidas em dois grupos principais, a saber:

- (i) os solúveis e
- (ii) os não-solúveis.

Esta classificação faz-se necessária para um melhor tratamento do problema, de modo a obter modelos mais adequados à realidade.

Na descrição dos modelos que serão apresentados a seguir, haverá uma distinção entre dois tipos de poluentes, a saber: **(i)** aqueles que não penetram na água (não-solúveis) e **(ii)** aqueles que penetram na água (solúveis).

3.1 No meio aéreo

Na primeira parte do trabalho aqui proposto, será modelado o transporte aéreo do poluente e seu depósito na superfície da lagoa ou baía[†]. A escolha do domínio se deve a uma suposição inicial de simetria por translação, levando, portanto, à escolha de um domínio bidimensional, conforme ilustrado na figura 2, a seguir.

O plano é escolhido na vertical e contendo o vetor que indica magnitude e direção predominantes do vento na região.

O modelo deverá, então, considerar a difusão do poluente estudado, seu transporte advectivo, seus decaimentos, além das fontes poluidoras e sua penetração no meio aquático, no caso **(ii)**.

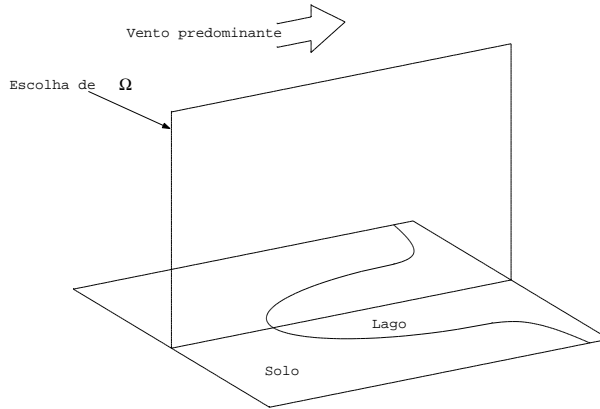


Figura 2: Escolha do domínio para estudo

Denominando $u(x, y, t)$ como sendo a concentração do poluente no ponto (x, y) , para o instante t , a equação que modela o processo, descrito acima, de dispersão efetiva do poluente, no domínio aéreo indicado na figura 2, pode ser dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \text{div}(\alpha_u \nabla u) + \text{div}(\vec{V}u) + \sigma_u u = f \quad (3.1)$$

[†]Usa-se, no escopo deste trabalho, a terminologia lagoa ou baía no sentido de indicar corpos aquáticos de baixa circulação

$$\text{onde } \left\{ \begin{array}{l} \alpha_u = \alpha_u(u, y, t), \\ \text{(é a difusibilidade efetiva no meio aéreo)} \\ \vec{V} = \langle v_1(x, y, t); v_2(x, y, t) \rangle \\ \text{com } \operatorname{div}(\vec{V}) = 0 \\ \sigma_u \quad \text{(é o decaimento no meio aéreo)} \\ f \quad \text{(é o termo fonte)} \end{array} \right.$$

Desta forma, o domínio[†] Ω (descrito pela figura 3) a ser considerado neste problema de valor de contorno, bem como as condições de contorno, serão genericamente indicadas por:

$$\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = g \quad (\text{local de entrada de poluente no domínio}) \quad (3.2)$$

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 u \quad (\text{penetração de poluente no solo}) \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = 0 \quad (\text{sem saída de poluente para o meio aquático}) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} = 0 \quad (\text{condição natural de simetria}) \text{ e} \quad (3.5)$$

$$u \Big|_{\Gamma_4} = 0 \quad \left(\begin{array}{l} \text{altura escolhida convenientemente distante para} \\ \text{que se possa considerar a inexistência de poluente} \end{array} \right) \quad (3.6)$$

3.2 Inclusão do Meio Aquático

Em segunda aproximação, inclui-se o meio aquático, no caso de substâncias poluentes que penetram na água. Neste caso, além da concentração de poluente no ar, indicado por $u(x, y, t)$, será designado por $a(x, y, t)$ a concentração do poluente na água no ponto (x, y) , para o instante t , na parte do domínio a

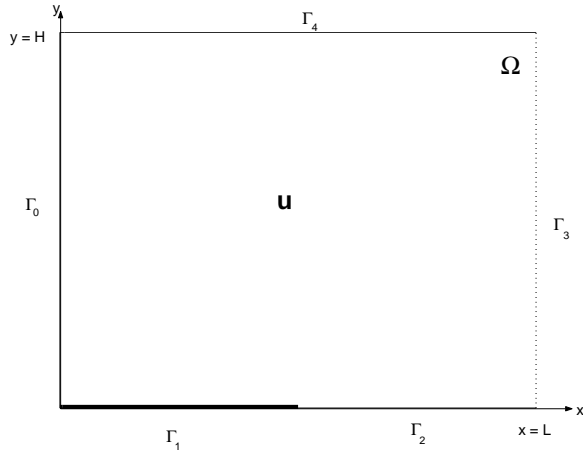


Figura 3: Descrição do domínio Ω de estudo
 $\Omega = (0, L) \times (0, H) \subset \mathbb{R}^2$

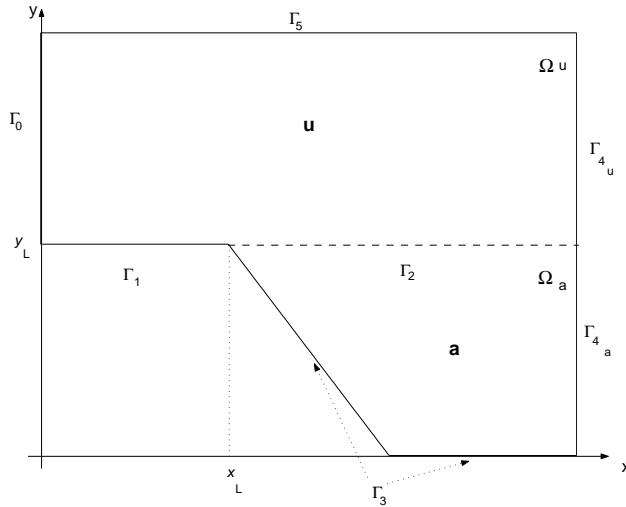


Figura 4: Incluindo o meio aquático no domínio de estudo

ser considerada (ver figura 4), bem como as condições de contorno, que neste

novos casos, passam a ser:

$$\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = g \quad (3.7)$$

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 u \quad (3.8)$$

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{12}(u - a) \Big|_{\Gamma_2} \quad (3.9)$$

$$-\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} = k_3 a \quad (\text{penetração do poluente no sedimento}) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4u}} = \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4a}} = 0 \quad (\text{condição de estabilidade assintótica}) \quad (3.11)$$

$$u \Big|_{\Gamma_5} = 0 \quad (\text{como em 3.6}) \quad (3.12)$$

$$-\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{21}(a - u) \Big|_{\Gamma_2} \quad (\text{passagem de poluente ar/água}) \quad (3.13)$$

A equação de continuidade do poluente no meio aquático é dada por:

$$\frac{\partial a}{\partial t} - \alpha_a \Delta a + \text{div}(\vec{\mathbf{W}} a) + \sigma_a a = \mathcal{F} \quad (3.14)$$

onde $\begin{cases} \alpha_a, & (\text{é a constante de difusibilidade efetiva no meio aquático}) \\ \vec{\mathbf{W}}, & \text{é o campo de velocidade em } \Omega_a \\ \sigma_a & (\text{é o decaimento global no meio aquático}) \end{cases}$

[‡] $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ sendo que $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ e Γ_4 são disjuntos

$$\mathcal{F} = \begin{cases} A_0 e^{-\kappa t} & \text{se } (x, y) = (x_L, y_L) \\ 0 & \text{se } (x, y) \neq (x_L, y_L) \end{cases} \quad \forall t \in [0, T]$$

A escolha de \mathcal{F} acima se deu, considerando que haja um acúmulo do poluente na fronteira Γ_1 e que o mesmo seja transportado pelos afluentes até o ponto de descarga no meio aquático - ponto (x_L, y_L) do domínio - tal como o efeito “*run off*”, no caso de campos de cultivo de arroz em várzea, comum em áreas alagáveis.

Estas equações é que constituem a chamada formulação clássica ou “forte” do problema. Tendo em vista a necessidade de demonstrar e obter, de algum modo, a existência e unicidade de solução do problema, bem como, visando a aplicação do método de Elementos Finitos, via Petrov/Galerkin para a discretização espacial, que dará as aproximações numéricas adequadas da solução para cada instante $t \in [0, T]$ faz-se necessária a obtenção da formulação variacional ou “fraca” do problema.

A formulação fraca é preferível visto que permite uma maior amplitude de ação tanto do analista (existência e unicidade de solução) quanto do analista numérico (algoritmos computacionais).

4 Formulação variacional

A formulação variacional do modelo consiste em obter uma outra formulação das equações 3.1 e 3.14, cuja solução, denominada solução fraca, deve ser procurada num espaço métrico conveniente. A justificativa de tal procedimento está na possibilidade de se poder usar funções que comportem modelos de descontinuidade por exemplo, para a função que modela alguns dos fenômenos presentes no problema, como no caso de fontes pontuais no domínio, típico de problemas como o que foi proposto neste estudo, ou “manchas” de poluentes.

O processo para obtenção da formulação variacional, é desenvolvido da seguinte forma:

1. Considerar as derivadas de 3.1–3.14 no sentido de distribuições;
2. efetuar o produto interno de cada termo das equações por uma função ν , denominada função teste, sendo esta pertencente a um subespaço conveniente de $H^1(\Omega)$, que será denotado por \mathcal{V} (caracterizado mais adiante),

sendo tal produto interno definido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left(f \middle| g \right) \Big|_{0;\Omega} &\doteq \iint_{\Omega} f \cdot g \, d\mu; \\ \left\langle f \middle| g \right\rangle \Big|_{0;\Gamma} &\doteq \int_{\Gamma} f \cdot g \, d\gamma. \end{aligned}$$

cuja integração é feita no sentido de Lebesgue.

Neste caso, serão procuradas as soluções $u(\mathcal{X}, t)$ e $a(\mathcal{X}, t)$, respectivamente, em \mathcal{V} e \mathcal{W} , dados por:

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T], H^1(\Omega_u)] : \nu = 0 \text{ em parte de } \Gamma(\Gamma_4 \text{ ou } \Gamma_5), \forall t \in [0, T] \} \\ \mathcal{W} &= \{ \omega \in \mathcal{L}^2[(0, T], H^1(\Omega_a)] : \omega = 0 \text{ em parte de } \Gamma(\Gamma_5), \forall t \in [0, T] \} \end{aligned}$$

Os subespaços \mathcal{V} e \mathcal{W} serão caracterizados, adiante, de forma mais específica para cada um dos casos considerados nas seções 3.1 e 3.2, apresentados anteriormente.

4.1 No meio aéreo

Considerando as equações apresentadas na seção 3.1 será obtida, a seguir, a formulação variacional para o caso dos poluentes não-solúveis, conforme comentado na seção prévia, caracterizando o subespaço \mathcal{V}_1 de $H^1(\Omega)$, como se segue:

$$\mathcal{V}_1 = \{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T), H^1(\Omega_u)] : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_4 \forall t \in [0, T] \}$$

Neste caso, tomando f genérica, com a entrada (por deriva) de poluente pela fronteira Γ_0 e, além disso, considerando o coeficiente de difusão aérea α_u variável com relação somente à altura y , tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_u(y) \nabla u) + \operatorname{div}(\vec{V}u) + \sigma_u u = f \quad (4.15)$$

Assim, realizando o produto interno conveniente, vem:

$$\begin{aligned} &\iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu \, d\mu - \iint_{\Omega} \nabla(\alpha_u(y) \nabla u) \nu \, d\mu + \iint_{\Omega} \nabla(\vec{V}u) \nu \, d\mu \\ &+ \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu \, d\mu = \iint_{\Omega} f \nu \, d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T] \end{aligned} \quad (4.16)$$

Desta forma, considerando funções e derivadas primeiras de quadrado integráveis, no sentido fraco, e tomando $\vec{V} = \langle V_1(y); -V_2 \rangle$ (conforme justificativa adiante), obtém-se:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega} \nabla(\alpha_u(y) \nabla u) \nu d\mu + \iint_{\Omega} V_1(y) \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]$$

ao fazer uso de um teorema do tipo Green, aplicado no segundo termo do lado esquerdo da equação 4.17, vem:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} \alpha_u(y) \nabla u \nabla \nu d\mu + \iint_{\Omega} V_1(y) \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu d\mu - \int_{\Gamma} \alpha_u(y) \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]$$

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

$$\alpha_u(y) = \alpha_0 + \alpha_u y, \alpha_u, \alpha_0 > 0 ; y \in [0, H]$$

e \vec{V} dado por:

$$\vec{V} = \langle V_1 y^2 ; -V_2 \rangle$$

onde $V_1 y^2$ é a componente horizontal resultante da deriva pelo vento predominante para uma primeira aproximação e V_2 é a componente vertical da velocidade resultante da ação gravitacional, supondo a resistência do ar linearmente proporcional à velocidade, de modo que seja plausível a aproximação (V_{∞}), assintoticamente, desta componente por uma constante, daí a equação (4.18) se torna:

$$\begin{aligned}
& \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_u y) \nabla u \nabla \nu d\mu + V_1 \iint_{\Omega} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\
& - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu - \int_{\Gamma} (\alpha_0 + \alpha_u y) \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma \\
& = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Finalmente, considerando as condições de contorno (Brooks e Hughes, 1982) dadas por (3.2–3.6), substituindo no último termo do lado esquerdo da eq. (4.19), vem:

$$\begin{aligned}
& \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_u y) \left(\nabla u \nabla \nu \right) d\mu + V_1 \iint_{\Omega} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\
& - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma \\
& = \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma + \iint_{\Omega} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Agora, usando a notação para o produto interno definida anteriormente nesta seção, a equação 4.20 pode ser reescrita na forma:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial u}{\partial t} \middle| \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} + \left((\alpha_0 + \alpha_u y) \nabla u \middle| \nabla \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} + V_1 \left(y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \middle| \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} \\
& - V_2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \middle| \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} + \sigma_u \left(u \middle| \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} + k_1 \left\langle u \middle| \nu \right\rangle \bigg|_{0;\Gamma_1} \\
& = \left\langle g \middle| \nu \right\rangle \bigg|_{0;\Gamma_0} + \left(f \middle| \nu \right) \bigg|_{0;\Omega} \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]
\end{aligned} \tag{4.21}$$

É importante observar que em (4.20) aparecem apenas as derivadas de primeira ordem, no sentido de distribuições ou “fraca”, da solução $u(x, y, t)$, enquanto na equação (3.1) aparecem as derivadas de segunda ordem, no sentido clássico.

Desta forma, passando dessa formulação clássica (3.1-3.6) para a formulação variacional (4.20), são enfraquecidas as hipóteses de regularidade da solução, o que proporciona um aumento da classe de funções para as quais o problema faz sentido.

Além disso, na formulação variacional, a demonstração de existência e unicidade da solução fraca se torna bem mais simples e, hoje, viável em comparação com a da solução clássica, cuja demonstração será tratada na próxima seção.

4.2 Existência e unicidade de solução

Considerando a formulação variacional obtida na seção prévia, será obtida a existência e unicidade da solução para a equação (4.20), de acordo com o que se segue.

Para estabelecer a existência e unicidade da solução de (4.20), será utilizado o Lema de Lax-Milgram (Lions, 1961, Teor. 1.1.3 - Cap. I, pg.8), observando que este problema na sua formulação variacional (eq. 4.20) satisfaz as hipóteses do citado teorema, seguindo o procedimento adotado, por exemplo, em (Diniz, 1994), (Castro, 1993) e (Mistro, 1992).

De fato, agrupando termos de (4.20) na forma abaixo e introduzindo a notação usada no referido teorema (Lions, 1961), tem-se:

$$\hat{A}(t; \bullet) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(A_{ij}(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} A_i(x, t) + A_0 \quad (4.22)$$

o que, em (4.20) mediante as escolhas indicadas mais abaixo, fornece:

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega} \hat{A}(t; u) \nu d\mu + \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma \\ &= \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma + \iint_{\Omega} f \nu d\mu + \left(\iint_{\Omega} u_0 \nu d\mu \right) \delta_0(t) \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T)$$

dadas as escolhas em (4.23) de:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \begin{cases} \alpha_0 + \alpha_u y & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \\ A_i &= \begin{cases} V_1 y^2 & \text{se } i = 1 \\ -V_2 & \text{se } i = 2 \end{cases} \\ A_0 &= \sigma_u \end{aligned}$$

lembrando que δ_0 é o operador de Dirac que “fixa” a condição inicial.

Para a demonstração de existência e unicidade da solução, basta verificar que (4.23) satisfaz as hipóteses do citado teorema.

4.3 Discretização do problema

Nesta seção, será feita a discretização do modelo, para a formulação obtida na seção 4 (eq. 4.20), através do Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal), descritos a seguir.

O primeiro passo da discretização, no caso a espacial, será via Método dos Elementos Finitos. Este método é uma técnica geral para construção de aproximações da solução de um problema de valor de contorno, que envolve a divisão do domínio da solução num número finito de subdomínios simples (os Elementos Finitos) e usando conceitos variacionais, construir uma aproximante da solução sobre a coleção de Elementos Finitos, (Becker et al., 1981); (Carey e Oden, 1981)).

O segundo passo, será o da discretização da variável temporal (no caso, Crank-Nicolson), optou-se por um método implícito com diferenças centradas (Carnahan et al., 1969), (Kardestuncer e Norrie, 1987), de modo a transformar os modelos, discretizados espacialmente, num sistema de equações algébricas lineares implicitamente definido (Sossae, 1995); (Diniz, 1994); (Castro, 1993) e (Mistro, 1992).

Para isso, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada pela equação (4.20). Denominando de \mathcal{V}_{h_1} o subespaço de \mathcal{V} gerado pelas N_{h_1} funções φ_i (chamadas de funções teste). Assim, $\forall \nu_{h_1} \in \mathcal{V}_{h_1}$ é da forma:

$$\nu_{h_1} = \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \nu_j(t) \varphi_j(x, y)$$

Neste modelo, como o processo de dispersão se dá apenas no ar, será feita a discretização do domínio aéreo (Ω), considerando o subespaço \mathcal{V}_{h_1} de \mathcal{V}_1 , a

eq. (4.20) pode ser reescrita na forma do seguinte sistema de EDO's:

$$\begin{aligned}
& \left(\widehat{A}(t; u_h) \Big| \nu_h \right) \Big|_{0; \Omega} + \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} \Big| \nu_h \right) \Big|_{0; \Omega} \\
& + k_1 \left\langle u_h \Big| \nu_h \right\rangle \Big|_{0; \Gamma_1} = \left\langle g \Big| \nu_h \right\rangle \Big|_{0; \Gamma_0} + \left(f \Big| \nu_h \right) \Big|_{0; \Omega} \\
& \forall \nu_h \in \mathcal{V}_{h_1}, \forall t \in (0, T)
\end{aligned} \tag{4.24}$$

o que, mediante as escolhas de A_{ij} , A_i e A_0 indicadas anteriormente, nos fornece o seguinte sistema de EDO's discretizado:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_u y) \left(\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \right) d\mu \\
& + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} y^2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\
& + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma = \\
& = \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \iint_{\Omega} \left(f \varphi_i \right) d\mu \quad \forall \varphi_i \text{ da base de } \mathcal{V}_{h_1}
\end{aligned} \tag{4.25}$$

A discretização seguinte é a da variável temporal, isso será feito pelo método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, fazendo as seguintes aproximações:

$$\begin{aligned}
& \frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \\
& \text{onde} \quad u_j^{n+1} = u_j(t_{n+1})
\end{aligned} \tag{4.26}$$

e

$$u_j \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \tag{4.27}$$

daí, levando (4.26) e (4.27) em (4.25), obtem-se o sistema linear

$$\mathcal{A}u^{(n+1)} = \mathcal{B}u^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}, \quad \text{dado} \quad u^{(0)} \tag{4.28}$$

onde

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \sigma_u\right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_u y) (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i d\mu) \\
&\quad + V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} y^2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu - V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
b_{ij} &= \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \sigma_u\right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu - \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_u y) \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i d\mu \\
&\quad - V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} y^2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu + V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu - k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
d_i^{n+\frac{1}{2}} &= \iint_{\Omega} \left(f(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot) \varphi_i \right) d\mu + \int_{\Gamma_0} g(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot) \varphi_i d\gamma \\
(u^{(0)} | \varphi_i) &= \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j^{(0)} (\varphi_j | \varphi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N_{h_1}
\end{aligned}$$

A matriz \mathcal{A} é chamada matriz de rigidez e o vetor resultante das operações $\mathcal{B} \cdot u^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}$, para cada instante $t_{n+\frac{\Delta t}{2}}$, é denominado vetor carga.

A ordem das aproximações temporais é, localmente, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e a escolha das funções teste φ_i será a de elementos finitos triangulares de primeira ordem.

Desta forma, obtém-se uma função “pirâmide” sobre cada nó, que é linear por partes, assumindo o valor 1 no j -ésimo nó e ZERO nos demais (ver figura 5).

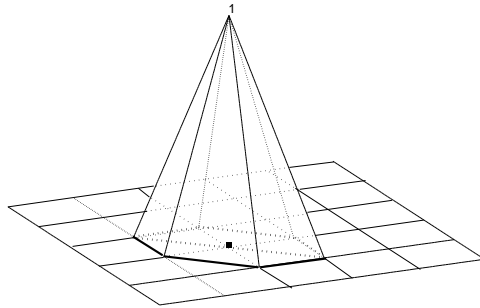


Figura 5: Ilustração da função base φ_i para o j -ésimo nó

A função esboçada na figura 5 é obtida a partir da definição por partes, em cada triângulo da discretização do domínio, onde são definidas localmente

(num triângulo de referência), três funções base, ou seja, uma para cada vértice do triângulo de referência, que assume o valor UM no i -ésimo vértice e ZERO nos outros dois, propriedade esta exigida para as candidatas à função base.

5 Formulação variacional incluindo o meio aquático

Nesta seção, será considerado o problema dos poluentes que penetram na água (solúveis), o que implica na reformulação do domínio conforme apresentado na figura 4 (pg.114), bem como as novas condições de contorno (Brooks e Hughes, 1982), estabelecidas pelas equações (3.1 e 3.7 a 3.13) da seção 3.2, para a obtenção da formulação variacional no caso dos poluentes solúveis.

Para este problema, os subespaços \mathcal{V}_{2_u} e \mathcal{V}_{2_a} de $H^1(\Omega = \Omega_u \cup \Omega_a)$, serão caracterizados da seguinte forma:

$$\mathcal{V}_{2_u} = \{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T), H^1(\Omega_u)] : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_5 \forall t \in [0, T] \}$$

$$\mathcal{V}_{2_a} = \{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T), H^1(\Omega_a)] : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_5 \forall t \in [0, T] \}$$

Neste caso, conforme denominado anteriormente, sendo $u(x, y, t)$ e $a(x, y, t)$ as concentrações do poluente nos meios aéreo e aquático, respectivamente, o sistema de equações resulta em:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla(\alpha_u \nabla u) + \nabla(\vec{V}u) + \sigma_u u = f \\ \frac{\partial a}{\partial t} - \alpha_a \Delta a + \nabla(\vec{W}a) + \sigma_a a = \mathcal{F} \end{cases} \quad (5.29)$$

Daí, aplicando o produto interno indicado na seção 4 em cada termo do sistema 5.29, vem:

$$\begin{cases} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_u} \nabla[(\alpha_u(y) \nabla u) \nu] d\mu + \iint_{\Omega_u} \nabla(\vec{V} \cdot u) \nu d\mu \\ \quad + \iint_{\Omega_u} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu, & \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_a} \alpha_a \Delta a \nu d\mu + \iint_{\Omega_a} \nabla(\vec{W} \cdot a) \nu d\mu \\ \quad + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \nu d\mu & \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{cases} \quad (5.30)$$

Novamente, considerando funções e derivadas primeiras de quadrado integráveis, no sentido fraco, tomando $\vec{V} = \langle V_1 y^2; -V_2 \rangle$, $\vec{W} = \langle W_1; -W_2 \rangle$ e f genérica (como em (4.19) da seção 4) obtém-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_u} \nabla [(\alpha_u(y) \nabla u) \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu, \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu - \alpha_a \iint_{\Omega_a} \Delta a \nu d\mu + \iint_{\Omega_a} \left(W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right) \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \nu d\mu \end{array} \right. \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \quad (5.31)$$

tomando os coeficientes de difusão no ar (Ω_u) e na água (Ω_a), respectivamente, por:

$$\alpha_u(y) = \alpha_0 + \alpha_u y, \quad \alpha_0, \alpha_u > 0; \quad y \in [0, Y] \quad e \alpha_a \text{ constante}$$

daí, fazendo uso de um teorema do tipo Green, aplicado no segundo termo do lado esquerdo de cada uma das equações do sistema 5.31, vem:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu \\ + V_1 \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu \\ - \int_{\partial \Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu \\ + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu \\ - \alpha_a \int_{\partial \Omega_a} \frac{\partial a}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (5.32)$$

Por fim, considerando as condições de contorno dadas pelas equações (3.7–

3.13) e levando-as no sistema 5.32, tem-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu \\ + V_1 \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma \\ + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu - \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma \\ + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} (u - a) \nu d\gamma = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \sigma_a \iint_{\Omega_a} a \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} (a - u) \nu d\gamma \\ + k_3 \int_{\Gamma_3} a \nu d\gamma = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (5.33)$$

que, após a separação das incógnitas, se torna:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu \\ + V_1 \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu \\ + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma + \int_{\Gamma_2} \beta_{12} u \nu d\gamma = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu \\ + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + \int_{\Gamma_3} k_3 a \nu d\gamma \\ = \beta_{21} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma + \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \nu d\mu; \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (5.34)$$

Como observado anteriormente, em (5.34) aparecem apenas as derivadas de primeira ordem, no sentido de distribuições, da solução $a(x, y, t)$, enquanto na equação (3.14) aparecem as derivadas de segunda ordem, no sentido clássico.

Passando da formulação clássica (3.1 e 3.14) para a variacional (5.34), as hipóteses de regularidade da solução são enfraquecidas, o que proporciona um aumento na classe de funções para as quais o problema faz sentido.

5.1 Existência e unicidade - com o meio aquático

De acordo com a formulação variacional obtida na seção anterior, tem-se a existência e unicidade da solução para o sistema (5.34), utilizando o Teorema de Lions (Lions, 1961, Cap. IV), para obter a existência e unicidade de solução para o problema na sua formulação variacional, basta verificar que a eq. 5.34 satisfaz as hipóteses do citado teorema.

5.2 Discretização incluindo o meio aquático

Nesta seção, será feita a discretização do modelo, para a formulação obtida na seção 5 (eq. 5.34), através do Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal), conforme descrito anteriormente.

Para isso, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada pela equação (5.34). Denominando de $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ os subespaços de \mathcal{V}_{2u} e \mathcal{V}_{2a} , respectivamente, gerado pelas $N_{h_{2u}}$ e $N_{h_{2a}}$ funções φ_i (chamadas de funções teste). Assim, $\forall \nu_{h_{2\bullet}} \in \mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ são da forma:

$$\nu_{h_{2u}} = \sum_{i=1}^{N_{h_{2u}}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y) \quad \nu_{h_{2a}} = \sum_{i=1}^{N_{h_{2a}}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y)$$

Neste modelo, o processo de dispersão ocorre em ambos os meios, com isso, será feita a discretização dos domínios aéreo e aquático (Ω_u e Ω_a , respectivamente), considerando os subespaços $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$, o que fornece para a eq.

(5.34):

$$\left\{ \begin{aligned}
 & \sum_{j=1}^{N_{h_2}} \frac{\partial u_j}{\partial t} \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_2}} u_j \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) (\nabla \varphi_j \nabla \varphi_i) d\mu \\
 & + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_2}} u_j \iint_{\Omega_u} y^2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_2}} u_j \iint_{\Omega_u} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\
 & + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_2}} u_j \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
 & + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma = \iint_{\Omega_u} f \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma \\
 & + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2u}} \\
 & \sum_{j=1}^{N_{h_2}} \frac{\partial a_j}{\partial t} \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + \alpha_a \sum_{j=1}^{N_{h_2}} a_j \iint_{\Omega_a} (\nabla \varphi_j \nabla \varphi_i) d\mu \\
 & + W_1 \sum_{j=1}^{N_{h_2}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - W_2 \sum_{j=1}^{N_{h_2}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\
 & + \sigma_a \sum_{j=1}^{N_{h_2}} a_j \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_3 \sum_{j \in \Gamma_3} a_j \int_{\Gamma_3} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
 & + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \varphi_i d\mu \\
 & + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}}
 \end{aligned} \right. \quad (5.35)$$

A figura 6, a seguir, ilustra a discretização do domínio, incluindo os dois meios e apresenta a função base $\varphi_i(x_j, y_j)$ para o j -ésimo nó. Neste caso, também foi escolhida a discretização por elementos triangulares de primeira ordem.

Novamente, via o método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, usando as aproximações (4.26) e (4.27) em (5.35), para a discretização

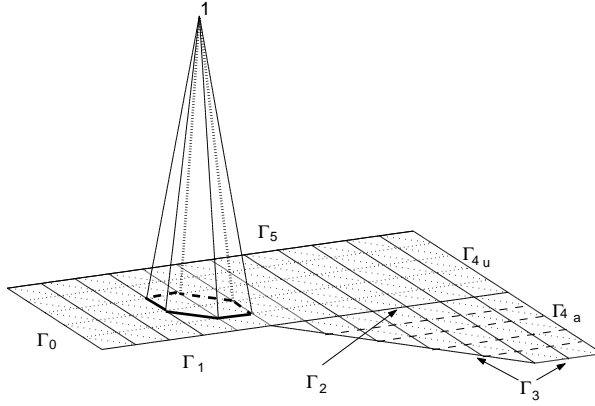


Figura 6: Ilustração da função base $\varphi_i(x, y)$

temporal, obtem-se o sistema linear acoplado:

$$\begin{cases} \mathcal{A}u^{(n+1)} &= \mathcal{B}u^{(n)} + e^{n+\frac{1}{2}} \\ \mathcal{C}u^{(n+1)} &= \mathcal{D}u^{(n)} + p^{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (5.36)$$

dados $u^{(0)}$ e $a^{(0)}$, onde

$$\begin{aligned} a_{ij} = & \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \sigma_u\right) \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y) \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i d\mu \\ & + V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu - V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu + k_1 \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{ij} = & \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \sigma_u\right) \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu - \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_u y_i) \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i d\mu \\ & - V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} y^2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu + V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu - k_1 \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_{ij} = & \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \sigma_a\right) \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + \alpha_a \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i d\mu \\ & + W_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu - W_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu + k_3 \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_{ij} &= \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \sigma_a\right) \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu - \alpha_a \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i d\mu \\
&\quad - W_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu + W_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega_a} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu - k_3 \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
e_i^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\iint_{\Omega_u} \left(f(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \bullet) \varphi_i \right) d\mu \right) + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_0} \left(g(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \bullet) \varphi_i \right) d\gamma \\
&\quad + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\
p_i^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\iint_{\Omega_a} \mathcal{F}(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \bullet) \varphi_j \varphi_i d\mu \right) \delta_L(\Omega) + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(u^{(0)}|\varphi_i) &= \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} u_j^{(0)}(\varphi_j|\varphi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N_{h_{2u}} \\
(a^{(0)}|\varphi_i) &= \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j^{(0)}(\varphi_j|\varphi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N_{h_{2a}}
\end{aligned}$$

e

$\delta_L(\Omega)$ é o operador delta de Dirac.

6 Considerações Finais

O presente modelo deverá ser testado para a situação real de dispersão de agrotóxicos na região de *Esteros del Ibera* (região nordeste da Argentina) - como parte do Projeto INCO-ERB IC18-CT98-0262/Unicamp, denominado “Manejo de Recursos Naturais em Regiões de Pantanal no Mercosul”).

Os códigos numéricos para o problema discretizado, encontram-se em fase de implementação e testes, cujos resultados numéricos deverão constar de futuras publicações.

Neste artigo, o intuito foi descrever o problema, suas formulações clássica e variacional, a existência e unicidade de solução e, por fim, a discretização do problema em sua formulação variacional.

Espera-se com isso, contribuir de alguma forma para o tratamento matemático adequado de um problema ambiental de grande interesse, tanto para estudos de impacto ambiental, quanto para estudos da “qualidade ambiental”.

Referências

- Becker, E. B., Carey, G. F., Oden, J. T., 1981. Finite Elements: an introduction. Vol. 1. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Brooks, A. N., Hughes, T. J. R., 1982. Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32, 199–259.
- Carey, G. F., Oden, J. T., 1981. Finite Elements: mathematical aspects. Vol. 4. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Carnahan, B., Luther, H. A., Wilkes, J. O., 1969. *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, New York.
- Castro, S. P. E., 1993. Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar. Tese de Mestrado, IMECC - UNICAMP, Campinas/SP.
- Connel, D. W., Miller, G. J., 1984. *Chemitry and Ecotoxicology of Pollution*. John Wiley & Sons, New York.
- Diniz, G. L., 1994. A mudança no habitat de populações de peixes: De rio a represa - o modelo matemático. Tese de Mestrado, IMECC - UNICAMP, Campinas/SP.
- C. D. C. Environmental Health, 2001. National report on human exposure to environmental chemicals, url: <http://www.cdc.gov/nceh/dls/report>. Centers for Disease Control and Prevention for Environmental Health. Atlanta, Georgia. 72p.
- Haque, R., Falco, J., Cohen, S., Riordan, C., 1980. Role of Transport and Fate Studies in the Exposure Assessment and Screening of Toxic Chemicals in *Dynamics, Exposure and Hazard Assessment of Toxic Chemicals*. Ann Arbor Science, Ann Arbor, Ch. I, pp. 47–67p.
- Kardestuncer, H., Norrie, D. H., 1987. *Finite Element Handbook*. McGraw-Hill, New York.
- Lions, J. L., 1961. *Equations Differentelles Operationelles*. Springer.

- Loehr, R. C., 1984. Pollution Control for Agriculture. Academic Press Inc., Orlando.
- Marchuk, G. I., 1986. Mathematical models in environmental problems. Vol. 16 of Studies in Mathematical and its Application. North-Holland, Amsterdam.
- Mellanby, K., 1982. Biologia da poluição, tradução Lúcia Baugartner Lambert. EDUSP, São Paulo.
- Mistro, D. C., 1992. O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação. Tese de Mestrado, IMECC - UNICAMP, Campinas/SP.
- National Research Council/USA, 2000. Scientific frontiers in developmental toxicology and risk assessment, url: <http://www.nap.edu/books/0309070864/html/>. National Academy Press, 10-16.
- Rebouças, A. C., 1997. Panoramas da degradação ambiental do ar, da água doce e da terra no Brasil. Academia Brasileira de Ciências (Ed.), Rio de Janeiro.
- Sossae, R. C., 1995. Dinâmica populacional densidade-dependente em processos de dispersão e migração. Tese de Mestrado, IMECC - UNICAMP, Campinas/SP.
- Thibodeaux, L. J., 1979. Chemodynamics. John Wiley & Sons, New York.