

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA POLUIÇÃO DE RIOS POR MERCÚRIO METÁLICO : O CASO EVOLUTIVO

JOÃO FREDERICO C. A. MEYER - UNICAMP

DHA - INECC / UNICAMP

DIOMAR CRISTINA MISTRO - UNICAMP

DHA - INECC / UNICAMP

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA POLUIÇÃO DE RIOS POR MERCÚRIO METÁLICO : O CASO EVOLUTIVO

JOÃO FREDERICO C. A. MEYER - UNICAMP

DHA - INECC / UNICAMP

DIOMAR CRISTINA MISTRO - UNICAMP

DHA - INECC / UNICAMP

§ 1. INTRODUÇÃO

A contaminação por mercúrio lançado ao meio ambiente oferece sérios riscos à biota e à população humana. Seus efeitos já foram verificados no Japão e no Canadá nos anos 50 e 60, posteriormente no Iraque, na Suécia e na Finlândia nos anos 70. A causa, na maioria dos casos, foi a ingestão de alimentos contaminados por mercúrio, especialmente peixes.

No Brasil, foram relatados casos de contaminação humana na Bahia, há cerca de 20 anos, e a causa foi a ingestão de mariscos contaminados pelo lançamento de mercúrio por uma indústria cloro-álcalis.

A mineração de ouro aluvial é uma atividade que aumenta a preocupação quanto à contaminação ambiental.

Este tipo de mineração envolve atualmente cerca de 600 mil garimpeiros espalhados por várias regiões brasileiras, com maiores concentrações na Amazônia (Rondônia, Roraima e Pará), norte do Mato Grosso e Goiás e norte do Rio de Janeiro (cf[11]).

Nosso intuito neste trabalho é o de modelar matematicamente e simular numericamente a presença de Hg⁰ em rios proveniente da mineração de ouro aluvional, através do Método de Elementos Finitos.

§ 2. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

De acordo com Silveira e outros (cf[12]), o ouro presente no Rio Madeira é extremamente fino - 60 a 80 mil fagulhas para se produzir um grama do metal precioso - e consequentemente o

percentual de perdas é muito grande. Por esse motivo, o Hg metálico é utilizado na amalgamação do ouro. Este processo envolve a mistura de Hg metálico com o sedimento fluvial, pré-concentrado gravimetricamente, e posterior separação da amálgama por queima e consequente volatilização do Hg.

Estimativas preliminares indicam que para cada kilograma de ouro produzido, pelo menos 1.32 kg de Hg é liberado para o meio ambiente, sendo cerca de 55% lançado na atmosfera por sublimação durante a queima e cerca de 45% na forma de Hg metálico lançado diretamente ao rio durante as diferentes fases do processo de extração.

Em [12], Silveira e outros ilustram este processo através de uma figura aqui reproduzida, ver fig.1. Este esquema mostra o ciclo esquemático do detino do Hg na região do Rio Madeira.

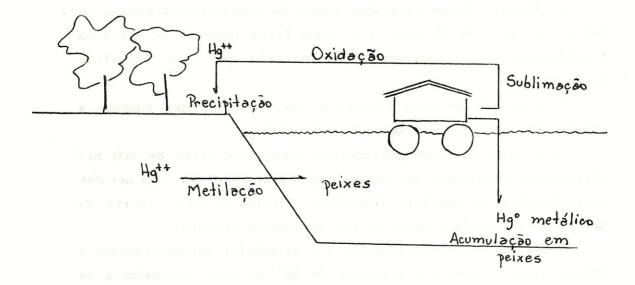


fig. 1

O Hg liberado diretamente para o rio, deverá depositar-se e eventualmente acumular-se no sedimento de fundo, ficando relativamente imóvel, uma vez que as condições físico-químicas do Rio Madeira não favorecem sua imediata remobilização.

A fração liberada para a atmosfera será rapidamente oxidada e carreada pelas precipitações para áreas adjacentes ao rio, geralmente ocupadas por matas tropicais. Nos solos e rios da floresta, de pH ácido e baixa condutividade, o processo de monometilação do Hg será favorecido, colocando o Hg novamente em disponibilidade.

Pretendemos modelar neste trabalho a concentração de Hg metálico lançado diretamente ao rio.

§ 3. O MODELO GENÉRICO

Consideramos o trecho do rio a ser estudado como sendo um prisma Σ , ilustrado na fig.2. Segundo Marchuk [7], MUrray [9], Okubo [10], Edelstein-Keshet [4], entre outros, sendo $C(t;\underline{x})$ a concentração de Hg num instante $t\in I=(0,T)$ e num ponto $\underline{x}\in\Sigma$; a equação que descreve o comportamento de $C(t;\underline{x})$ em I X Σ é:

$$\frac{\partial C}{\partial t}$$
 - div (α grad C) + σ C + div (V C) = f (3.1)

Esta equação incorpora quatro fenômenos distintos, quais sejam:

- (1) O fenômeno de difusão, que é um processo pelo qual as partículas se movimentam aleatoriamente. Descrevemos a difusão através do termo div (α grad C) onde α é o coeficiente de difusibilidade do mercúrio na água.
- (2) O decaimento da concentração de Hg que se dá, por exemplo, pela ingestão das partículas por peixes que retêm parte desse mercúrio ou ainda pela passagem direta do Hg para a forma metilada, entre outras razões. Este fenômeno aparece na equação (3.1) no termo σ C onde σ é a taxa de decaimento. O significado dessa quantidade fica especialmente claro se colocamos $\alpha = 0$, f = 0 e $\mathbb{V} = 0$, obtendo a equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sigma C = 0$$

The first state of the first series and the series of the

pli als collective every or confluctable screen to the confluctable of the confluence of the collective confluence of the collective collective

oo esawata ki takkani ni ili yi

The state of the s

track the first with end and the first series of the first series

arising, and the entire symmetric formation for the symmetric and the symmetric symmet

per l'alles per montresses el est de la manuel el manuel el est de la estada de la composición del composición de la composición del composición de la composición del composición del composición de la composición del composición

makter outpressure for melarities and address out the teacher and address of the teacher and t

n - 1

da vazão do rio onde o domínio estudado foi um corte transversal desse rio.

Nessa segunda abordagem, procuramos usar o modelo (3.1) com uma nova escolha de domínio. O propósito é o de incluir o fenômeno de transporte do mercúrio pela própria vazão do rio.

Vamos supor um trecho do rio suficientemente longo de maneira que a concentração $C(t; \underline{x})$ de Hg seja nula a jusante — situação esta que ocorre de fato [13].

Estudaremos agora a concentração $C(t;\underline{x})$ de Hg em uma secção longitudinal do rio, ilustrada na fig.3 e que identificamos como Ω .

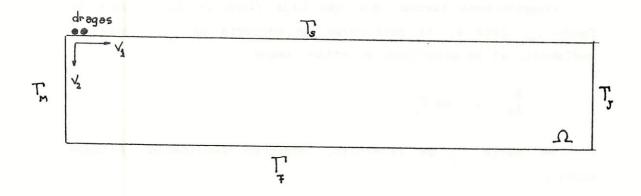


fig. 3

Supomos que o mercúrio despejado por algumas dragas a montante desloca-se uma distância limitada rio abaixo no plano Ω por meio de fluxo laminar nunca ultrapassando, porém, a secção de reta $\Gamma_{_{\rm J}}$ que identifica a extremidade do prisma.

Com essa abordagem do problema, introduzimos no modelo a ação da correnteza, além da ação da gravidade. Para isto tomamos o campo \mathbb{V} — do termo div (\mathbb{V} C) — não mais como ($0,\mathbb{V}_2$) (vide [8]), mas como sendo \mathbb{V} = (\mathbb{V}_1 , \mathbb{V}_2) onde \mathbb{V}_1 representa a velocidade horizontal da correnteza que carrega as partículas rio abaixo e \mathbb{V}_2 a velocidade vertical das partículas de Hg deslocadas pela ação da gravidade em direção ao fundo do rio.

Tomamos o coeficiente de difusibilidade do Hg na água como

sendo constante, o que faz com que o termo de difusão torne-se $-\alpha$ ΔC .

Consideramos que não haja entrada nem saída de Hg pela parte $\Gamma_{\rm M}$ da fronteira, ou seja, admitimos que não haja entrada de mercúrio proveniente de dragas acima do trecho considerado, isto é:

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{\text{M}} .$$

Na superfície $\Gamma_{\rm S}$ do rio, admitimos que não haja perda de Hg por evaporação e, portanto,

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = 0$$
 em Γ_s .

Consideramos também, que não haja fluxo de Hg através do fundo $\Gamma_{\rm F}$, isto é, as partículas de mercúrio não atravessam o sedimento, aí se acumulando e, então, temos:

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = 0$$
 em Γ_F .

Na parte $\Gamma_{_{_{\hspace{-.1em}J}}}$ da fronteira, conforme mencionado, estamos supondo

$$C(t;x,y) = 0.$$

Inicialmente, para t ≤ 0, admitimos as dragas, aqui consideradas como as fontes de Hg, desligadas em termos de emissão, sendo ligadas e emitindo mercúrio a partir do instante subsequente (t > 0). Temos assim, como condição inicial:

$$C(0; x, y) = 0$$
 em Ω .

Desse modo, então, a E.D.P. que modela esta abordagem do problema fica:

$$\frac{\partial C}{\partial t}$$
 - $\alpha \Delta C$ + σC + $V_1 \frac{\partial C}{\partial x}$ + $V_2 \frac{\partial C}{\partial y}$ = f em I X Ω (4.1)

e, as condições de contorno e inicial são dadas respectivamente por:

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{S} \cup \Gamma_{H} \cup \Gamma_{F},$$

$$C(t; x, y) = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{J} \quad e$$

$$C(0; x, y) = C_{O}(x, y) = 0 \quad \text{em} \quad \Omega.$$

$$(4.2)$$

§ 5. FORMULAÇÃO VARIACIONAL

Ao fazermos a formulação clássica para esta abordagem do problema de difusão/advecção de Hg, deparamo-nos com o mesmo problema de abordagem anterior: as fontes poluidoras não são necessariamente contínuas nas variáveis espaciais e temporal (ê bastante razoável, aliás, supor que não o sejam!). Recorremos então, à formulação variacional, com a qual exigimos apenas que f seja de quadrado Lebesgue integrável.

Assim, fazendo a formulação variacional de (4.1), obtemos para cada t \in I:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} v \, ds - \alpha \int_{\Omega} \Delta C v \, ds + \sigma \int_{\Omega} C v \, ds + V_{1} \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} v \, ds + V_{2} \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial y} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, ds, \quad \forall v \in V \in H^{1}(\Omega),$$

onde
$$V = \{ v \in H^1(\Omega) : \frac{\partial C}{\partial \eta} = 0 \text{ em } \Gamma - \Gamma_J \text{ e } v = 0 \text{ em } \Gamma_J \}$$

Aplicando o Teorema de Green e usando as condições de contorno (4.2) na segunda integral do primeiro termo, obtemos:

$$\begin{split} & \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \, v \, \, ds \, \, + \, \, \alpha \, \int_{\Omega} \, \nabla C \, \, \nabla v \, \, ds \, \, + \, \sigma \, \int_{\Omega} C \, \, v \, \, ds \, \, + \, \, V_1 \, \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \, v \, \, ds \, \, + \\ & + \, \, V_2 \, \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial y} \, v \, \, ds \, \, = \, \, \int_{\Omega} f \, \, v \, \, ds \, \, , \quad \forall \, \, v \, \in \, V. \end{split}$$

Usando a notação do produto escalar em $L^2(\Omega)$, escrevemos o

problema acima da seguinte forma:

Achar C : I \longrightarrow V tal que, para cada t \in I, valha:

$$\langle \frac{\partial C}{\partial t} | \mathbf{v} \rangle + \alpha \langle \nabla C | \nabla \mathbf{v} \rangle + \sigma \langle C | \mathbf{v} \rangle + \mathbf{V}_{1} \langle \frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}} | \mathbf{v} \rangle +$$

$$+ \mathbf{V}_{2} \langle \frac{\partial C}{\partial \mathbf{y}} | \mathbf{v} \rangle = \langle f | \mathbf{v} \rangle, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}$$

$$(5.1)$$

Fazendo:

$$a(t; u, v) = \alpha \langle \nabla C | \nabla v \rangle + \sigma \langle C | v \rangle + \frac{V}{1} \langle \frac{\partial C}{\partial x} | v \rangle + \frac{V}{2} \langle \frac{\partial C}{\partial v} | v \rangle$$

е

$$L_f(v) = \langle f | v \rangle$$

o problema (5.1) se reduz a encontrar $C \in L^2(I; V)$ tal que, para cada $t \in I$, valha a seguinte igualdade:

$$\langle \frac{\partial C}{\partial t} | v \rangle + a(t; u, v) = L_f(v), \forall v \in V$$
 (5.2)

Em termos de existência e unicidade da solução procurada, estamos nas condições do seguinte teorema de Lions (cf[6]):

Se o operador a(t; u, v) é tal que:

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

(ii)
$$| a(t; u, v) | \le M \| u \|_{H^{1}(\Omega)} \cdot \| v \|_{H^{1}(\Omega)}; e$$

(iii)
$$\exists \lambda$$
 tal que
$$a(t; u, u) + \lambda \| u \|_{L^{2}}^{2} \geq \delta \| u \|_{H^{1}(\Omega)}, \quad \delta > 0, u \in V;$$

e se

(iv) L_f(v) é contínuo,

então o problema variacional (5.2) admite uma única solução.

De fato, temos

- (1) Mensurabilidade do operador a(t;u,v), está garantida pela própria definição de a(t;u,v).
- (2) Continuidade de a(t;u,v) : \forall $t\in I$, tomando μ_0 = máx $\{\alpha,\sigma\}$, pela desigualdade de Cauchy temos

$$\alpha \int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, ds + \sigma \int_{\Omega} u \, v \, ds \leq \mu_0 \, \| \, u \, \|_{H^1(\Omega)}. \, \| \, v \, \|_{H^1(\Omega)}.$$

Da desigualdade de Hölder,

$$V_{2} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \, v \, ds \leq V_{2} \, \left\| \, \frac{\partial u}{\partial y} \, \right\|_{L^{2}} \cdot \left\| \, v \, \right\|_{L^{2}} \leq V_{2} \, \left\| \, u \, \right\|_{H^{1}} \cdot \left\| \, v \, \right\|_{H^{1}}$$

e,

$$V_{1} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} \, v \, ds \leq V_{1} \, \left\| \, \frac{\partial u}{\partial x} \, \right\|_{L^{2}} \cdot \left\| \, v \, \right\|_{L^{2}} \leq V_{1} \, \left\| \, u \, \right\|_{H^{1}} \cdot \left\| \, v \, \right\|_{H^{1}}$$

e então,

(3) Coercividade de a(t;u,v)

Sabemos que:

$$\begin{split} a(t;v,v) &+ \lambda \parallel v \parallel_{L^2}^2 &= \alpha \int_{\Omega} \sum_{i} \left| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right|^2 ds + (\lambda + \sigma) \int_{\Omega} \left| v \right|^2 ds \\ &+ V_2 \int_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| \cdot \left| v \right| ds + V_1 \int_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \cdot \left| v \right| ds. \end{split}$$

Tomando $V_0 = \max_{0} \{V_1, V_2\}$ e usando a desigualdade de Hölder, temos que:

$$a(\mathsf{t};\mathsf{v},\mathsf{v}) + \lambda \parallel \mathsf{v} \parallel_{\mathsf{L}^2}^2 \geq \alpha \sum_{\mathsf{i}} \parallel \frac{\partial \mathsf{v}}{\partial \mathsf{x}_{\mathsf{i}}} \parallel_{\mathsf{L}^2}^2 + (\lambda + \sigma) \parallel \mathsf{v} \parallel_{\mathsf{L}^2}^2 -$$

Usando o recurso clássico fornecido pela desigualdade

 $-ab \ge \frac{\varepsilon}{2} a^2 - \frac{1}{2\varepsilon} b^2$ para a,b quaisquer positivos a desigualdade acima torna-se

$$a(t; \mathbf{u}, \mathbf{v}) + \lambda \| \mathbf{v} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} \ge \alpha \sum_{i} \| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} + (\lambda + \sigma) \| \mathbf{v} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} - \frac{\mathbf{v}_{0}}{2} \sum_{i} \| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{y}} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} - \frac{\mathbf{v}_{0}}{2\epsilon} \| \mathbf{v} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} =$$

$$= (\alpha - \frac{\mathbf{v}_{0} \epsilon}{2}) \sum_{i} \| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2} + (\lambda + \sigma - \frac{\mathbf{v}_{0}}{2\epsilon}) \| \mathbf{v} \|_{\mathbf{L}^{2}}^{2}$$

Logo temos:

$$a(t;v,v) \geq \delta \| v \|_{\dot{H}^1}^2$$

onde $\delta = \min \{ (\alpha - \frac{V_0}{2}), (\lambda + \sigma \frac{V_0 \varepsilon}{2 \varepsilon}) \}$ e $\delta > 0$, bastando escolher λ , ε de modo conveniente.

(4) Continuidade do operador L_f(v), ou seja,

$$\left|\begin{array}{c|c}L_{\mathbf{f}}(\mathbf{v})\end{array}\right| \leq \left\|f\right\|_{\mathbf{L}^{2}} \cdot \left\|\mathbf{v}\right\|_{\mathbf{L}^{2}}, \ \forall \ \mathbf{v} \in \mathbf{V}.$$

De fato, pela desigualdade de Hölder, temos

Portanto, estão garantidas a existência e a unicidade da solução do problema variacional (5.2).

§ 6. DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL DO PROBLEMA

Visando o uso do Método dos Elementos Finitos nas variáveis espaciais, optamos pelo Método de Galerkin para fazermos a discretização dessas variáveis. Assim, sejam $\mathbf{V}_{\mathbf{h}}$ um subespaço de dimensão finita de \mathbf{V} e { $\boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{1}}$, $\boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{2}}$, · · · , $\boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{N}}$ } uma base desse subespaço.

Uma aproximação C_h ∈ V_h da solução C será escrita como:

$$C_h(t; x, y) = \sum_{i=1}^{N} C_i(t) \cdot \varphi_i(x, y)$$
, (6.1)

para a qual

$$\frac{\partial C}{\partial t}h^{(t;x,y)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{d}{dt}C_{i}^{(t)} \cdot \varphi_{i}^{(x,y)}$$

onde os $C_i(t)$ são as funções a serem determinadas, correspondendo (para cada $t \in I$) aos coeficientes da discretização espacial.

Agora então, o problema (5.2) no subespaço V_h passa a ser:

Achar $C_1(t)$, $C_2(t)$, $C_3(t)$, \cdots , $C_N(t)$ tais que, para cada $t \in I$:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{dC}{dt} i^{(t)} \langle \varphi_{i} | \varphi_{j} \rangle + \alpha \sum_{i=1}^{N} C_{i}(t) \langle \nabla \varphi_{i} | \nabla \varphi_{j} \rangle + \sigma \sum_{i=1}^{N} C_{i}(t) \langle \varphi_{i} | \varphi_{j} \rangle +$$

+
$$V_{1}\sum_{i=1}^{N}C_{i}(t) \langle \frac{\partial \varphi}{\partial x}i|\varphi_{j}\rangle$$
 + $V_{2}\sum_{i=1}^{N}C_{i}(t) \langle \frac{\partial \varphi}{\partial y}i|\varphi_{j}\rangle$ =

=
$$\langle f | \varphi_j \rangle$$
, $j = 1, 2, ..., N$.

ou

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{dC}{dt} i^{(t)} \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle +$$

+
$$\sum_{i=1}^{N} C_{i}(t) \left[\alpha \langle \nabla \varphi_{i} | \nabla \varphi_{j} \rangle + \sigma \langle \varphi_{i} | \varphi_{j} \rangle + V_{2} \frac{\partial \varphi}{\partial y} i | \varphi_{j} \rangle + V_{1} \frac{\partial \varphi}{\partial x} i | \varphi_{j} \rangle \right] =$$

$$= \langle f | \varphi_j \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, N$$
 (6.2)

que é um sistema de equações diferenciais ordinárias expresso matricialmente como

$$\mathbb{A} \frac{dC}{dt} + \mathbb{D} C = \mathbb{B}$$
 (6.3)

onde as notações são evidentes.

§ 7. DISCRETIZAÇÃO DO INTERVALO DE TEMPO

Na discretização da variável do tempo, a opção foi pelo Método de Crank-Nicolson, no qual temos $C_i^{(n)} \approx C(t_n; x_i, y_i)$ e

$$\frac{d}{dt} C_i (t_n + \frac{\Delta t}{2}) = \frac{C_i (t_{n+1}) - C_i (t_n)}{\Delta t}$$

além de,

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

ambas da ordem de $(\Delta t)^2$.

Faremos ainda, como é usual,

 $0=t_0$, $t_i=t_0+i\cdot\Delta t$, $\Delta t=T/N_T$, onde N_T ê o número de subintervalos com os quais é particionado o intervalo I.

Assim, a equação (6.2) passa a ser:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{C_{i}^{(n+1)} - C_{i}^{(n)}}{\Delta t} \langle \varphi_{i} | \varphi_{j} \rangle +$$

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{C_{i}^{(n+1)} + C_{i}^{(n)}}{2} \left[\alpha \left\langle \nabla \varphi_{i} \middle| \nabla \varphi_{j} \right\rangle + \sigma \left\langle \varphi_{i} \middle| \varphi_{j} \right\rangle + \bigvee_{i} \frac{\partial \varphi}{\partial y} i \middle| \varphi_{j} \right\rangle + \bigvee_{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} i \middle| \varphi_{j} \right\rangle \right] =$$

$$= \left\langle f^{(n+1/2)} \middle| \varphi_{j} \right\rangle, \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

Usando a notação:

$$\begin{array}{l} \mathbf{a_{ij}} = \langle \varphi_i \, | \varphi_j \rangle \; , \\ \\ \mathbf{d_{ij}} = \alpha \; \langle \nabla \varphi_i \, | \nabla \varphi_j \rangle \; + \; \sigma \; \langle \varphi_i \, | \varphi_j \rangle \; + \; \mathbf{V_2} \, \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{y}^i} \, | \varphi_j \rangle \; + \; \mathbf{V_1} \, \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}^i} \, | \varphi_j \rangle \; e \\ \\ \mathbf{b_{ij}} = \langle f \, | \varphi_j \rangle \; , \end{array}$$

a equação se torna

$$\sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n+1)} a_{ij} - \sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n)} a_{ij} + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n+1)} d_{ij} + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n)} d_{ij} =$$

$$= \frac{\Delta t}{2} \left(b_{j}^{(n+1/2)} \right), \quad j = 1, 2, ..., N \quad (6.4)$$

Agrupando-se os termos de (6.4) de maneira conveniente, podemos reescrever a equação acima como

$$\sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n+1)} (a_{ij} + \frac{\Delta t}{2} d_{ij}) = \sum_{i=1}^{N} C_{i}^{(n+1)} (a_{ij} - \frac{\Delta t}{2} d_{ij}) + \frac{\Delta t}{2} (b_{j}^{(n+1/2)}), j = 1, 2, ..., N \quad (6.5)$$

Temos então, N sistemas lineares da forma:

$$[A + \frac{\Delta t}{2} D] C^{(n+1)} = [A - \frac{\Delta t}{2} D] C^{(n)} + B^{(n+1/2)}$$
 (6.6)
sendo $C^{(0)} = 0$.

Em suma, foram efetuados dois passos maiores de simplificação do problema:

- (1) A discretização espacial via Galerkin/Elementos Finitos e,
- (2) A discretização temporal usando Crank-Nicolson.

Isto corresponde a calcular, a cada passo no tempo, um vetor de coeficientes $(C_i^{(n)})_i$ que aproxima os valores de $C(t_n; x_i, y_i)$ onde x_i, y_i são os nós da discretização espacial e t_n os passos da discretização temporal.

Nem sempre é possível "fornecer" à equação os valores de $b_j^{(n+1/2)}$. Nesses casos, pode-se usar $\frac{1}{2}$ $(b_j^{(n+1)} + b_j^{(n)})$ mantendo-se a ordem da aproximação em $(\Delta t)^2$.

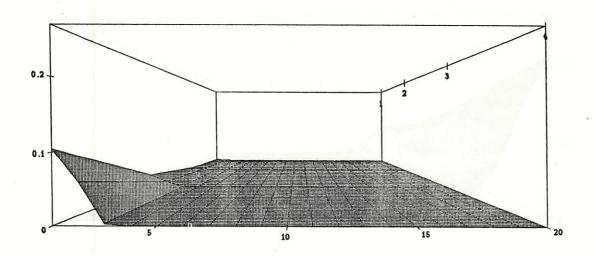
§ 7. RESULTADOS NUMÉRICOS

Nos ensaios numéricos que fizemos, usamos Elementos Finitos de primeira ordem numa triangulação regular.

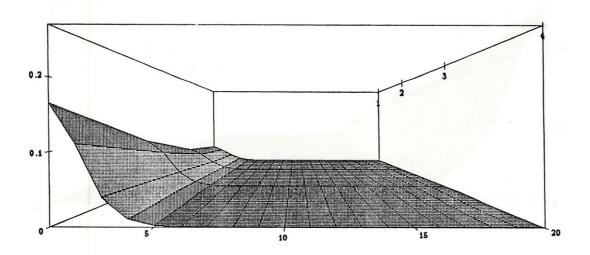
As fontes poluidoras localizam-se em apenas alguns elementos (simulando a emissão localizada de Hg feita pelas dragas, que de fato ficam agrupadas em uma "fofoca" — denominação popular do local em que se está encontrando maior quantidade de ouro).

Apresentamos, abaixo, os gráficos da concentração de mercúrio que obtivemos ao considerar o coeficiente de difusividade $\alpha=1$, o coeficiente de dispersão $\sigma=0.008$ e o vetor V com componentes V = 0.5 e V = -0.5. Cada gráfico corresponde à concentração de mercúrio no corte Ω , em diferentes instantes de tempo.

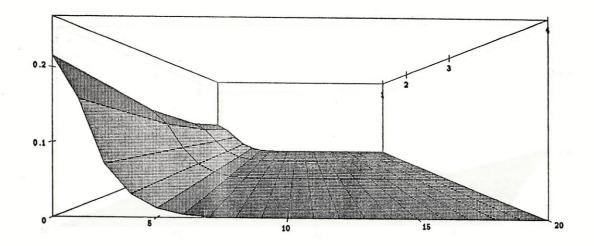
Para t = 0.1 unidade de tempo:



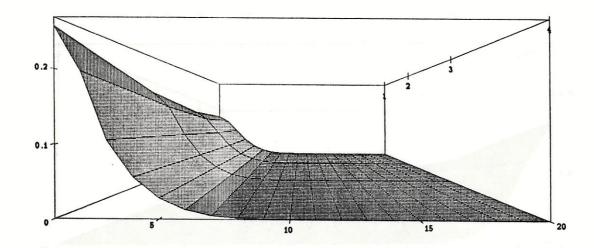
Para t = 0.4 unidade de tempo:



Para t = 0.7 unidade de tempo:



Para t = 1 unidade de tempo:



Estes gráficos foram animados por meio do pacote MATHEMATICA.

Presentemente estão sendo feitos ensaios com o uso de
Up-winding para estudos comparativos.

§ 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Carey, G. F. et Oden, J. T., Finite Elements, Prentice-Hall Englewood Cliffs, 1984.
- [2] Ciarlet, P. G., The Finite Element Method for Elliptic Problems. Amsterdam, North-Holland, 1987.
- [3] Crank, J., The Mathematics of Diffusion 2nd ed., Clarendon, Oxford, 1975.
- [4] Edelstein-Keshet, L., Mathematical Models in Biology, Random House/Birkhauser, 1987.
- [5] Johnson, C., Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Elements Method, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.
- [6] Lions, J. L., Equations Diferentielles Operationnelles, Springer, Berlim, 1961.
- [7] Marchuk, G. I., Mathematical Models in Environmental Problems, Studies in Mathematics and Its Application, Vol #16, North-Holland, 1986.
- [8] Meyer, J. F. et Mistro, D. C., Um Modelo para o Estudo do Problema de Difusão de Mercúrio em Rios, Trabalho apresentado no XII CNMAC, Águas de Lindóia, 1990.
- [9] Murray, J. D., Mathematical Biology, Berlim, Springer, 1989.
- [10] Okubo, A., Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models, Biomathematics, Vol #10, Springer, Berlim, 1980.
- [11] Pfeiffer, W. C.; Malm, O.; Souza, C. M. M.; Lacerda, L. D.; Silveira, E. G., A Ameaça do Mercúrio nos Garimpos, Ciência Hoje, Vol #11, n⁰ 61, 1990.
- [12] Silveira, E. G. et al, Contaminação por Mercúrio na Amazônia: Avaliação Preliminar do Rio Madeira (Rondônia), 1- CBGq, Vol #2, 1987.

[13] Soares, P. V., Estudo da Contaminação por Mercúrio e Metais Pesados em Garimpo de Ouro Primário - O Estudo do Caso da Região de Pilar de Goiás e Guarinos - Goiás, Tese de Mestrado, Instituto de Geociências, UNICAMP, Campinas, 1990.