

Modelos Matemáticos de Impacto Ambiental - uma visão introdutória

João Frederico C. A. Meyer
IMECC - UNICAMP
C.P. 6065
13083-970 Campinas, SP - Brasil
joni@ime.unicamp.br

Sumário:

1. Os primeiros modelos
 2. A conservação de massa e a Equação de Difusão
 3. Alguns casos em dimensão única
 4. Modelos de superfície (ou casos em duas dimensões)
 5. A poluição de Mares Costeiros - o caso da Ilha de S. Sebastião, Brasil
- Referências Bibliográficas

1. Os primeiros modelos

Nas primeiras aproximações do estudo da presença de poluentes no ambiente, foi feito uso de uma antiga equação diferencial bastante comum em cursos clássicos de Equações Diferenciais Ordinárias. Nelas considera-se um rio de fluxo dado por F unidades de volume por unidade de tempo, restringindo as observações a uma região formando um volume de V unidades. Se considerarmos a presença de uma quantidade inicial de poluente, em termos de unidades de massa, u_0 , e, além disso, uma fonte de poluente, em unidades de massa por unidade de tempo, q ou $q(t)$, teremos a equação diferencial ordinária de primeira ordem a coeficientes constantes e não homogênea (no caso de q ser uma fonte não nula) e o correspondente Problema de Valor Inicial:

$$\frac{du}{dt} = -\frac{F}{V} \cdot u + q \quad \text{com } u(t_0) = u_0$$

ou, de modo equivalente, $\frac{du}{dt} + \frac{F}{V} \cdot u = q$.

Esta equação, junto com sua condição inicial u_0 tem como solução:

$$u(t) = u_0 \cdot e^{-\frac{F}{V}t} + \frac{qV}{F} (1 - e^{-\frac{F}{V}t}).$$

Observando esta solução analítica distinguem-se duas partes: uma primeira que identifica o decaimento exponencial da quantidade de poluente observada de início e uma segunda parte que tende, também assintoticamente, para uma presença fixa de poluente originada pela emissão $q(t)$.

Por mais simples que seja esta primeira abordagem, ela permite uma primeira estimativa de despoluição de lagoas ou corpos aquáticos de baixa circulação: a partir de

uma quantidade inicial \mathbf{u}_0 , e sem a presença de fontes, temos um decaimento clássico.

Nesta primeira abordagem, o corpo aquático foi tratado como um todo, com a suposição de que ocorra uma homogeneização instantânea do poluente no meio aquático. Há, no entanto, diversos modelos que dividem o meio em determinadas regiões, chamadas de compartimentos, e as suposições feitas acima são “quebradas” para cada compartimento. Assim, numa segunda aproximação, iremos dividir a região a ser estudada em partes estanques que chamaremos de compartimentos. Cada um desses compartimentos será considerado com o que contém de poluente, e com o que aos vizinhos cede ou deles recebe, e, ainda, o que vier a ser consumido aí dentro. Denominando por α_{ij} a fração de transferência, por unidade de tempo, de poluente do compartimento C_i para o compartimento C_j e de σ_i a fração de decaimento do compartimento C_i por unidade de tempo, teremos:

$$\left\{ \frac{dC_i}{dt} = -(\sigma_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij}) \cdot C_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ji} \cdot C_j \text{ para } i = 1, 2, \dots, n. \right.$$

No caso de rios de pequeno e médio portes, é usual considerar apenas um compartimento em toda a largura do rio, de modo que um compartimento apenas recebe material do compartimento imediatamente anterior, e só fornece material para o compartimento imediatamente seguinte, de modo que a fórmula anterior se torna:

$$\left\{ \frac{dC_i}{dt} = -(\sigma_i + \alpha_{i,i+1}) \cdot C_i + \alpha_{i-1,i} \cdot C_{i-1} \text{ para } i = 1, 2, \dots, n. \right.$$

O que se obtém, conseqüentemente, é o sistema de Equações Diferenciais Ordinárias dado por:

$$\frac{d\vec{C}}{dt} = M \cdot \vec{C}(t), \text{ para uma matriz } M \text{ dada por :}$$

$$\begin{bmatrix} -\sigma_1 - \alpha_{12} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_{12} & -\sigma_2 - \alpha_{23} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_{23} & -\sigma_3 - \alpha_{34} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{34} & -\sigma_4 - \alpha_{45} & \dots & 0 \\ \dots & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_{n-1,n} & -\sigma_n - \alpha_{ne} & \end{bmatrix}$$

e, embora haja a solução analítica, obtida com o cálculo do autosistema dessa matriz, o que se faz na maioria das vezes - principalmente por causa de problemas numéricos - é utilizar algum método eficiente de tipo Runge-Kutta de 4ª ordem. Pode-se considerar também que alguns dos parâmetros não sejam constantes, mas que podem variar no tempo - um motivo adicional para recorrer a métodos numéricos.

Os resultados obtidos, não obstante a simplicidade do modelo, têm sido muito utilizados em diversos locais diferentes, sendo esta a técnica tanto de trabalhos como os

adotados pela principal agência de proteção ambiental nos Estados Unidos (Environmental Protection Agency) como em Institutos Europeus de Pesquisa (através de um *software* denominado **HYDRO/Ecolex**). Estes modelos, embora não “expliquem” os fenômenos presentes quando um poluente se movimenta tanto por difusão quanto transportado pela correnteza de um rio, conseguem - a seu modo - “ver” essa movimentação, e daí vem sua relevância e seu uso bastante difundido! Um ensaio prático, usando o *software* *Populus* deu o seguinte resultado em que cada gráfico representa a quantidade de poluente presente no compartimento correspondente. As diferentes magnitudes se devem ao fato de que nem todos os compartimentos têm o mesmo tamanho:

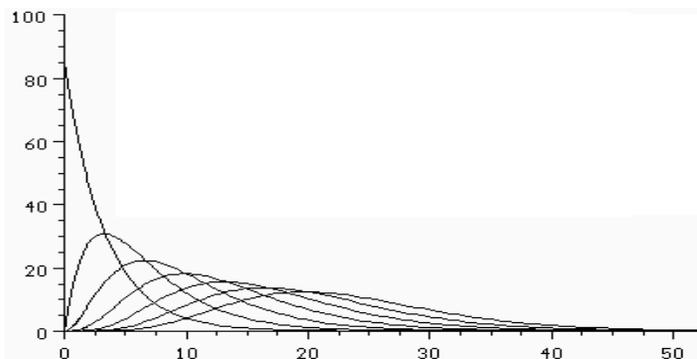
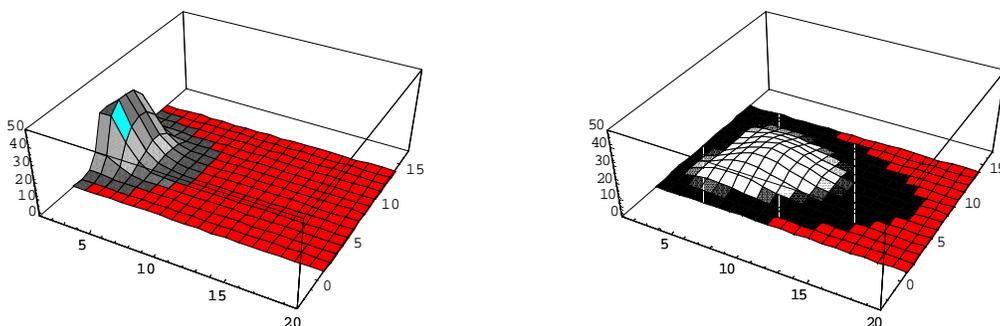


Figura 1: Cada curva representa a concentração em um compartimento.

Para rios de porte maior, como, por exemplo, os rios da Amazônia internacional, tem sido proposta uma subdivisão do compartimento único na largura do rio, com o uso de diversos compartimentos transversais. Nesse caso, é possível tratar com diferentes valores a passagem de poluente de um compartimento ao seguinte (na direção rio abaixo) para diferentes posições, respeitando a maior velocidade no centro do rio e velocidades bem menores à medida que se está mais próximo à margem. Neste caso, a matriz M acima descrita passa a ter mais do que apenas as duas diagonais, mas a abordagem na aproximação da solução continua a mesma. Um trabalho realizado por GEORGES (1998) forneceu, ao longo de diversos passos no tempo, as figuras abaixo que simulam o movimento de uma mancha de poluente transportada rio abaixo com esta técnica.



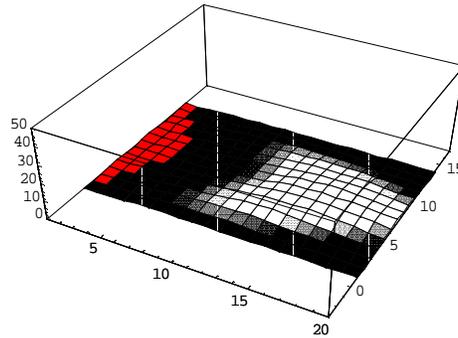


Figura 2: Cada superfície indica, em momentos diferentes, a concentração do poluente na superfície do rio.

Uma crítica relevante a este tipo de abordagem, porém, tem suas razões: à medida que aumenta a mobilidade do poluente no meio estudado, maior deveria ser o número de compartimentos necessários para continuar a visualizar o que ocorre, e isso sem que sejam modelados os principais fenômenos envolvidos. O passo seguinte, então, é o de considerar, na modelagem, as variáveis espaciais e não apenas a variável temporal.

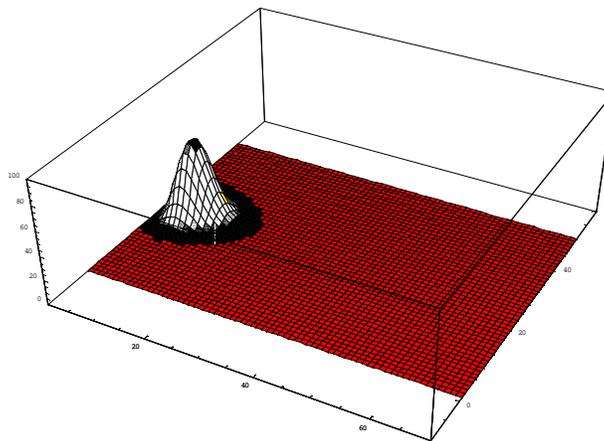


Figura 3: Vemos o poluente concentrado numa mancha antes de ser transportado rio abaixo.

2. A Conservação de Massa e a Equação de Difusão

A equação básica com a qual trabalha grande parte dos pesquisadores de Ecologia Matemática no campo que se convencionou chamar de **Ecotoxicologia** é a Equação de Conservação da Massa. Uma das formas desta Lei é:

“Em uma dada região, a taxa de variação da concentração da massa por unidade de tempo é igual à taxa de variação da massa que entra menos a que sai dessa região, a menos de sorvedouros ou fontes que possam aí existir.”

Para expressar esta suposição em termos matemáticos, a variável comumente adotada é a concentração daquilo cuja presença no meio se deseja estudar: $c = c(x,t)$. Temos, então,

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, y, z; t) = -\text{div}(-\alpha \vec{J}(x, y, z; t) + \vec{V} \cdot c) + f(x, y, z; t) \text{ no domínio estudado.}$$

Aqui, temos que o fluxo é considerado não somente como aquela parte do poluente que é transportado por um campo de velocidades $\vec{V}(x,y,z;t)$, mas também o fluxo devido à difusão que ocorre no sentido contrário ao do gradiente da concentração, seja essa difusão de partículas, seja ela turbulenta. Esta última se refere a fenômenos em escala significativamente maior: é o que denomina Marchuk de difusão efetiva. Além disso, temos uma fonte (ou um sorvedouro) dada por $f(x,y,z;t)$.

A dedução desta fórmula pode ser achada em diversos trabalhos: duas das provas clássicas encontram-se em CRANK e em EDELSTEIN-KESHET.

A equação a derivadas parciais com a qual iremos modelar, portanto, fenômenos de difusão-advecção vai ser precisamente esta, acrescida de um termo de decaimento do poluente no meio estudado:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}.c) + \sigma.c + f(x, y, z; t), \quad \text{para } (x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \text{ e } t \in (0, T].$$

O termo do decaimento supõe que a taxa de perda do poluente é instantaneamente proporcional à quantidade desse poluente no meio e no instante considerado. O espaço, indicado como \mathbb{R}^n , pode se referir a espaços de uma, duas ou três dimensões.

É importante assinalar, também, que outros parâmetros podem variar no espaço, no tempo e até com a própria concentração do poluente. Em alguns casos, por exemplo, temos a difusibilidade podendo permanecer constante, ou variar no espaço ou ainda depender da concentração de poluente: $\alpha = \alpha(x, y, z; t; c)$. Analogamente, poderemos ter uma dependência de σ do mesmo tipo, isto é, variando com o tempo, no espaço ou dependendo da concentração da substância cuja presença no meio se deseja estudar. O petróleo, por exemplo, em algumas de suas fases exige esta modelagem: $\alpha = \alpha(x, y, z; t; c)$ e $\sigma = \sigma(x, y, z; t; c)$.

A seguir, iremos relatar como este modelo pode ser usado em algumas situações que admitem simplificações aceitáveis e que modelam alguns casos da presença de poluentes no meio. Nesses casos será possível considerar, também algumas condições iniciais e de contorno.

3. Alguns casos em dimensão única

Um caso de poluição de corpos aquáticos que tem se tornado comum em diversos lugares do mundo, mas sobretudo em certas regiões da América Latina, é o da presença de cinzas provenientes de queimadas. No caso da queima da cana de açúcar, que é efetuada para aumentar o rendimento na época da colheita, a "chuva" de cinzas acidifica a coluna de água, afetando a cadeia trófica de modo significativo.

No caso de lagoas ou fundos de baía, regiões de circulação muito reduzida, o modelo, inicialmente apresentado em três dimensões pode ser reduzido ao caso

unidimensional, com o estudo de fenômenos de difusão ao longo da coluna de água, desde que simetrias geométricas da região sob análise o permitam. Sendo este o caso, o que temos, então é a seguinte equação:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{\partial c}{\partial x} - V \cdot c \right) - \sigma \cdot c + f(x, t), \text{ para } x \in \Omega \subset \mathbb{R} \text{ e } t \in (0, T].$$

No caso estacionário, o mais simples, e considerando a superfície como a origem da variável espacial e o tamanho da coluna de água como F, teríamos:

$$-\alpha \frac{d^2 c}{dx^2} + V \cdot \frac{dc}{dx} + \sigma \cdot c = f(x), \text{ para } x \in [0, F] = \Omega \subset \mathbb{R}.$$

Usando uma notação mais adequada à visualização de simplicidades, teríamos: $-\alpha \cdot c'' + V \cdot c' + \sigma \cdot c = f$, para x no intervalo citado e as condições no contorno que, neste caso, corresponde aos extremos do intervalo [0, F]. Em alguns casos, não há o termo em que figura a velocidade V - são os casos dos hidrossóis. Por outro lado, pode acontecer de existir um campo de velocidades que leve o material estudado em direção ao fundo, como naquelas situações em que poluentes pesados têm uma velocidade vertical, considerada constante, da superfície para o fundo. Neste caso, a equação se torna:

$$-\alpha \frac{d^2 c}{dx^2} + V_{\infty} \cdot \frac{dc}{dx} + \sigma \cdot c = f(x). \text{ Aqui, } V_{\infty} \text{ representa tal campo de velocidades.}$$

É necessário, em seguida, tratar das condições de contorno. São alguns os casos possíveis. Um deles, por exemplo, é o de uma coluna suficientemente alta de modo que o poluente estudado não chega até o fundo e, portanto, $c(F) = 0$. Além disso, se este poluente não sofrer evaporação, poderíamos ter, na superfície: $\left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{x=0} = 0$. Se, no

entanto, houvesse evaporação, uma primeira abordagem poderia ser a de se supor essa perda de matéria através da superfície como proporcional à quantidade de poluente aí existente, e teremos, nesse caso, $\left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{x=0} = k \cdot c(0)$.

Algumas das maiores dificuldades no tratamento analítico deste problema residem nos tipos possíveis de fontes poluentes $f(x)$. No caso de fontes bem comportadas, as soluções analíticas podem ser facilmente obtidas com as técnicas comuns de Equações Diferenciais Ordinárias, visto que as equações são lineares e a coeficientes constantes, ainda que não-homogêneas.

Uma dessas situações de dificuldade é correspondente ao da chuva de cinzas, em que as cinzas são depositadas com uma velocidade baixíssima no sentido vertical, resultando em uma fonte que existe apenas para $x=0$. Isto acontece quando se trata de fontes que se comportam como funções de *Dirac* em determinados pontos. Este tipo de fonte impede o uso de técnicas analíticas aplicadas imediatamente, exigindo algumas vezes, uma regularização mínima.

Em outros casos, como em chuvas mais fortes, temos situações mais regulares, e tratamentos analíticos podem se mostrar como eficientes.

Resta, então estudar esses mesmos casos na situação evolutiva, quando temos:

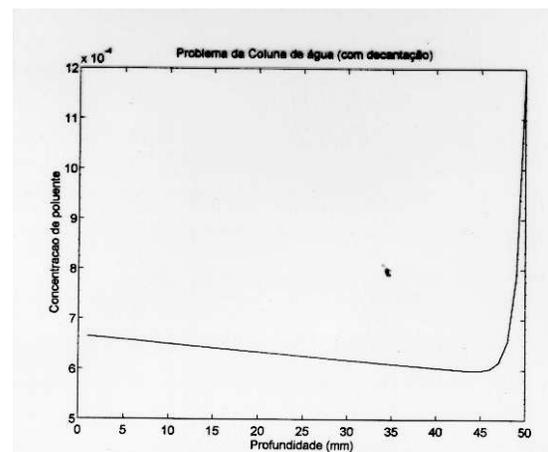
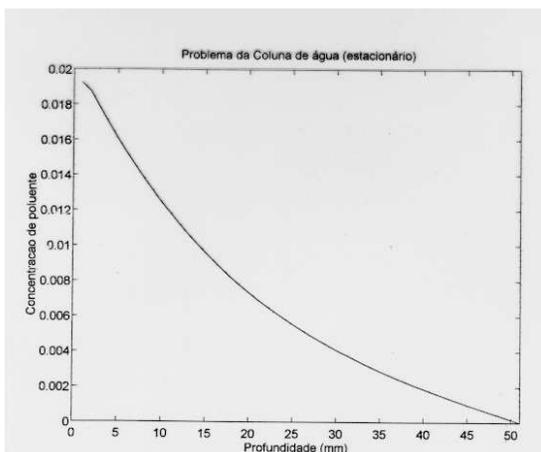
$$\frac{\partial c}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}(V \cdot c) + \sigma \cdot c = f(x, t), \text{ para } x \in \Omega \subset \mathbb{R} \text{ e } t \in (0, T]$$

considerando-se a difusibilidade constante ($\alpha = \text{constante}$); os métodos numéricos funcionam melhor (ou simplesmente funcionam!) quando o campo de velocidades, V , é não dissipativo, isto é, $\text{div}(V) = 0$.

Além das situações relatadas acima, acrescidas da componente evolutiva, poderemos, também ter um caso em que não há fontes, mas uma distribuição inicial de um poluente pesado (e, então, há um campo de velocidades no sentido de cima para baixo). Além disto, podemos considerar que o poluente não penetra no sedimento, mas aí se acumula e, finalmente, que esse poluente não permanece na superfície. As condições de contorno seriam:

$$c(0) = 0 \text{ e } \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{x=F} = 0.$$

Estes casos mencionados não esgotam as possíveis situações, mas indicam caminhos na modelagem e na aproximação das soluções em que se reduz o problema a uma única dimensão. Não é necessário muito esforço para que se possa perceber o quanto este tipo de modelo pode se afastar de toda uma gama de casos que, de fato, existem. Entretanto, também devemos reconhecer que, como passo inicial para se considerar alguns fenômenos, este tipo de abordagem pode se prestar muito bem a estudos iniciais. As figuras abaixo indicam as aproximações numéricas para algumas das situações aqui descritas.



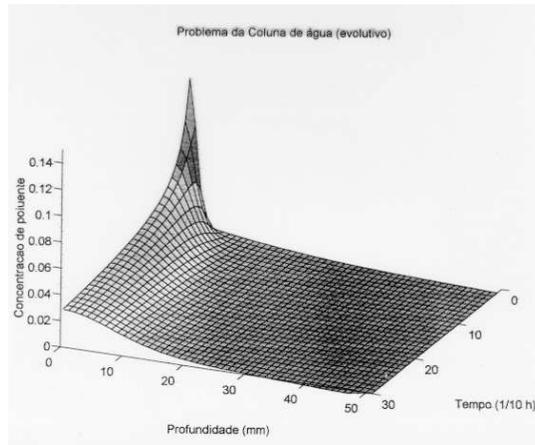


Figura 4: Exemplos de simulações unidimensionais.

4. Modelos de superfície (ou casos em duas dimensões)

Situações sem movimento horizontal - como correntes, marés, ventos, por exemplo - podem ser abordadas inicialmente como os modelos do tipo indicado acima. Tratando-se dos movimentos mencionados, temos de aceitar a necessidade de se ampliar a dimensão do espaço, e se originam os modelos em duas dimensões. A equação geral é a mesma,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}.c) - \sigma.c + f(x, y, t), \quad \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T].$$

Como no parágrafo anterior iremos, a seguir, apresentar alguns casos em que este tipo de aproximação bidimensional de uma realidade em \mathbb{R}^3 se presta ao estudo e a uma compreensão de realidades ambientais. Como no parágrafo anterior, também, será necessário apresentar (e discutir!) algumas hipóteses de que precisamos nas diversas simplificações dos problemas.

Um dos primeiros estudos é aquele em que se estuda a localização de fontes de poluição do ar. Embora o problema seja claramente tridimensional, uma das primeiras abordagens, considerando domínios bastante amplos, de dezenas de quilômetros de largura e de comprimento e, sendo a altura no máximo, algumas centenas de metros, usa-se o "mapa", ou seja, reduz-se o domínio às dimensões x e y , como na formulação anterior. É um tipo de situação em que se considera a direção e a magnitude predominante do vento, considerando-o como um vetor constante, e escolhendo uma das direções como a mesma desse vetor vento, reduzindo-o a um vetor com apenas uma das componentes. Assim, obtemos uma formulação do tipo:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \alpha \Delta c - V. \frac{\partial c}{\partial x} - \sigma.c + f(x, y, t), \quad \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T].$$

O domínio para esta primeira abordagem está representado na figura abaixo:

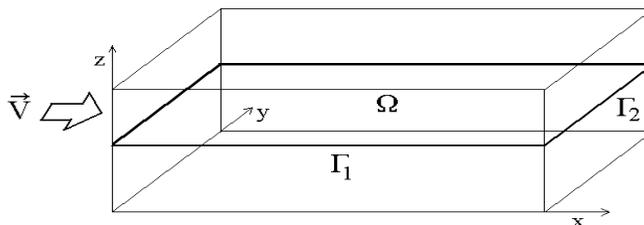


Figura 5: Exemplo de domínio para primeira abordagem.

Outras hipóteses simplificadoras foram consideradas além daquela da redução do domínio a um retângulo:

- a) a difusibilidade é constante em todas as direções (algo que não seria possível se a variável z estivesse presente);
- b) o decaimento pode ser considerado como diretamente proporcional à própria concentração do poluente.

Há, ainda, uma outra consideração fundamental:

- c) o fluxo de ar está sendo considerado como laminar, algo suficientemente longe da realidade a ponto de se considerar a possibilidade de descartar quaisquer resultados obtidos.

Apesar desta última observação, os primeiros resultados de simulação obtidos com este modelo indicam comportamentos qualitativos com os quais certas estratégias podem ser tratadas (a este respeito, ver MARCHUK). O caso genérico, estudado em MEYER e PALOMINO-CASTRO, foi motivado por uma ação privada em conjunto com autoridades locais, em que o governo estadual de São Paulo propôs a construção de uma nova usina termo-elétrica no município de Paulínia, perto da Universidade Estadual de Campinas. Um órgão desta Universidade, o Núcleo de Estudos e Pesquisas Ambientais (NEPAM) patrocinou um conjunto de estudos sobre os efeitos em meso e macro-escalas e, neste conjunto, a modelagem matemática, indicando qualitativamente que, embora a decisão sobre a construção fosse local, do âmbito da cidade de Paulínia - e apenas desse âmbito - os efeitos principais se fariam sentir fora dos limites da cidade, sobretudo nas regiões ao norte de Campinas, onde se localizam duas das suas universidades, e o principal hospital da região. É necessário reafirmar que os resultados numéricos têm valor bastante limitado, já que as autoridades responsáveis em nada cooperaram com a definição dos parâmetros. Mas é necessário enfatizar, também, que os resultados obtidos com parâmetros genéricos são bastante incisivos:

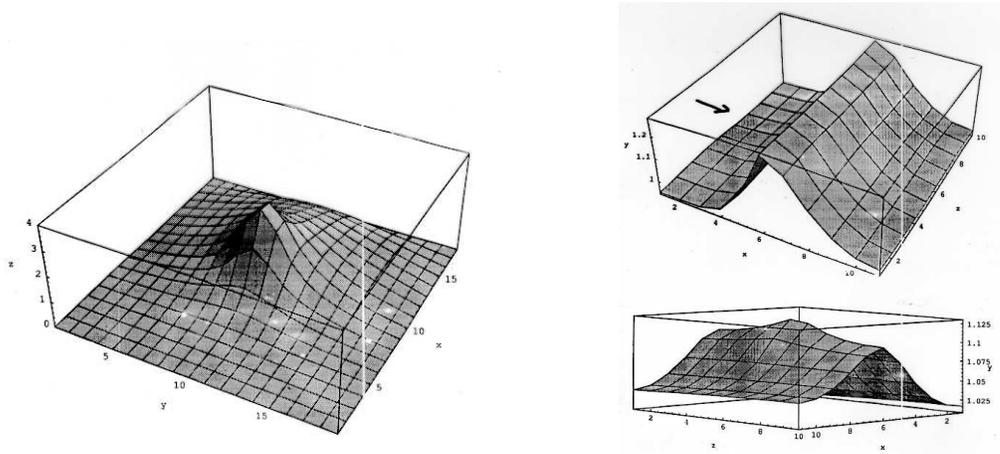


Figura 6: Modelagem de poluição aérea na região de Paulínia.

Também podemos usar a simplificação bidimensional para considerar o que acontece num domínio contido no plano vertical formado pelas variáveis x e z : é o que se pode ver na figura imediatamente abaixo

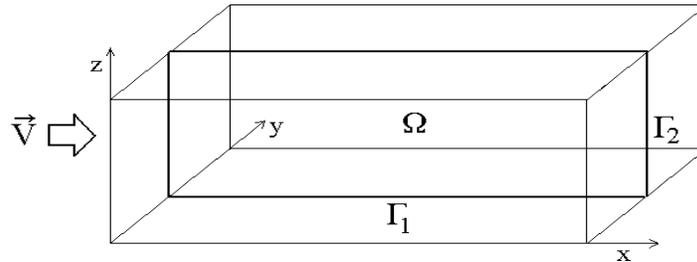


Figura 7: Exemplo de domínio para segunda abordagem.

Neste caso, temos a influência local do vento e, respeitadas as hipóteses que simplificam o problema, temos o seguinte:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}[\alpha(z) \cdot \nabla c - \vec{V}(z) \cdot c] - \sigma \cdot c + f(x, z, t), \quad \text{para } (x, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T].$$

- Em primeiro lugar, consideramos que a difusibilidade (em primeira aproximação!) varia linearmente com a altitude, e assumimos $\alpha(z) = \alpha_0 + \beta_0 \cdot z$, para $z \in [0, H]$.
- Também devemos considerar o perfil de velocidades, e o vetor das velocidades tem a segunda componente nula, indicando que os poluentes considerados não têm advecção vertical, mas tem a primeira componente variando com z , num perfil parabólico:

$$V_2(z) = W \cdot z^2,$$

onde W representa, na realidade, uma proporção da velocidade do vento. Em alguns casos, este W representa uma parte da magnitude (cerca de 12%) do que se mede a 12 metros de altura do solo.

- Assim, temos, também aqui, um campo não-dissipativo, visto que $\text{div}(V) = 0$.

A equação indicada acima se torna, conseqüentemente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - (\alpha_0 + \beta_0 \cdot z) \cdot \Delta c + W \cdot z^2 \frac{\partial c}{\partial x} - \beta_0 \frac{\partial c}{\partial z} + \sigma \cdot c = f(x, z, t),$$

para $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in (0, T]$.

Na aproximação numérica destes casos citados, uma dificuldade aparece, proveniente da presença do termo advectivo. A aproximação deste termo pode provocar o surgimento de uma difusão artificial, motivo pelo qual deve ser usada uma técnica especial para velocidades maiores. Na realidade há um limite (denominado Núcleo de Péclet) para o qual os métodos tradicionais ainda funcionam bem. Acima desse citado limiar, porém, instabilidades surgem. Outras instabilidades também podem aparecer como resultado da aproximação no tempo, mas são, neste caso, dificuldades que tendem assintoticamente a desaparecer com metodologias como as de Crank-Nicolson, por exemplo.

Um outro caso que se pode tratar do ponto de vista bidimensional, e usando o mesmo modelo genérico de difusão-advectação, é o da presença de poluentes em rios. Aqui, raciocínios semelhantes àqueles feitos para problemas de poluição aérea podem ser adaptados, trabalhando sucessivamente com o "mapa" do rio (simplificando e reduzindo o rio a duas dimensões horizontais) ou com cortes verticais (estudando o que acontece em um plano vertical ao longo do meio do rio que contenha simultaneamente a velocidade predominante da corrente e o campo de velocidades devido ao peso do poluente, levando-o para o sedimento). Ambos os casos podem ser encontrados em MEYER e MISTRO, inclusive com estratégias para evitar as instabilidades numéricas citadas. O problema que motivou estes estudos foi a grave situação da poluição de rios da Amazônia pela presença de mercúrio (que aí sofre a transformação de mercúrio metálico para metil mercúrio e é na forma metilada que é mais nocivo, atacando, em seres humanos, a mielina e dando origem àquilo que, depois do desastre de Minamata, se chamou de "mal dos gatos"). De acordo com WOLFGANG, o Brasil pode ter sido responsável, em determinados períodos por cerca de 11% da poluição mundial por mercúrio.

Do ponto de vista da modelagem matemática, a Equação a Derivadas Parciais é a mesma usada acima, apenas com uma substancial modificação nas escolhas de certos parâmetros e na localização de condições de contorno semelhantes. A difusibilidade α do poluente será considerada constante nestes casos e em todos os subseqüentes. Em geral, em rios de grande porte, o comprimento e a largura do corpo de água em movimento são significativamente maiores do que a profundidade - especialmente no caso que motivou o estudo mencionado, o do Rio Madeira, onde se localizavam mais de 6000 dragas de garimpo do ouro, num trecho de rio reto, sem curvas e muito largo. Olhando para esta parte do rio de cima para baixo, vendo-lhe apenas a superfície como seu mapa, podemos fazer uma primeira simplificação, reduzindo o domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ a duas dimensões: x e y .

Neste caso, o eixo da variável x aponta no sentido do principal movimento do rio, suposto laminar, e o perfil de velocidades é quadrático (segundo a Lei de Poiseuille). Deste modo, a velocidade tem componente nula na direção y , e uma componente na direção de x que depende apenas de y , garantindo que $\text{div}(\mathbf{V})=0$:

$$\mathbf{V} = (0, 4 \cdot V_c \cdot y \cdot (L - y)/L^2),$$

para L representando a largura do rio e V_c a velocidade no centro do rio, a velocidade da "calha".

As condições de contorno devem, nesta aproximação, indicar que não há mercúrio na fronteira do domínio que representa o rio subindo a correnteza, assim como devem indicar que ou não há passagem do mercúrio para a margem, ou que essa passagem é proporcional à quantidade de mercúrio no local; na fronteira de rio, seguindo no sentido da corrente, rio abaixo, a quantidade de mercúrio que "desce" o rio também é proporcional à quantidade de mercúrio aí existente. A equação, com as condições de contorno se torna, então:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \alpha \Delta c - V(y) \cdot \frac{\partial c}{\partial x} - \sigma \cdot c + f(x, y, t), \quad \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T]$$

com a fronteira de Ω dividida em partes disjuntas Γ_0, Γ_1 e Γ_2 tais que

$\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, com

$$c|_{\Gamma_0} = 0, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = 0 \text{ e } \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_2} = k \cdot c.$$

Complementando esta abordagem, há a segunda aproximação, em x e z , na qual se considera um plano vertical e se acrescenta ao modelo um vetor velocidade com duas componentes: uma componente na direção da variável x que varia em y , $V_1(y)$ além de uma componente vertical V_∞ que representa a velocidade de descida do poluente considerado da superfície para o sedimento no fundo. Além disto, podemos considerar que, devido ao peso do mercúrio, ele não é levado rio abaixo pela correnteza, mas permanece no trecho estudado do rio (em sua forma metálica!).

Assim, conforme a existência de perda de poluente para o sedimento ou nenhuma passagem por essa parte da fronteira, teremos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \alpha \Delta c - V_1(y) \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + V_\infty \cdot \frac{\partial c}{\partial z} - \sigma \cdot c + f(x, z, t), \quad \text{para } (x, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T]$$

com a fronteira de Ω dividida em partes disjuntas Γ_0, Γ_1 e Γ_2 tais que

$\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, com

$$c|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_2} = 0, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = 0 \text{ ou } \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = k \cdot c$$

5. A poluição de Mares Costeiros - o caso da Ilha de S. Sebastião, Brasil

Nesta parte final do presente texto, iremos, mais uma vez, fazer uso da mesma equação utilizada imediatamente acima: a Equação de Difusão-Advecção. Evidentemente, a escolha dos parâmetros, a definição de condições inicial e de contorno e a forma dos domínios a serem adotados destacam as diferenças daquilo que precedeu.

Como acima, também iremos apresentar a motivação deste estudo: na costa sudeste do Brasil, no estado de São Paulo, há a cidade de São Sebastião em frente da qual há uma ilha oficialmente chamada de Ilha de São Sebastião, mas conhecida por todos como Ilhabela, e com bom motivo. No canal entre a ilha e o continente há um₁₂

terminal da Companhia Brasileira de Petróleo (Petrobrás) pelo qual passa mais do que 55% de todo o óleo transportado no Brasil. Essa intensa utilização das dependências desse terminal vem acompanhada de um histórico impressionante: mais de 200 acidentes registrados nos últimos 20 anos! Há cerca de três anos a Companhia do estado de São Paulo responsável pela preservação, tecnologia, fiscalização e tributação do meio (denominada de CETESB), em conjunto com a Petrobrás definiram um programa para a elaboração de um Manual de Procedimentos em caso de Acidentes de Derrames de Óleo na região do Canal. Parte dessa Manual dedicava-se à elaboração de cenários nos quais, a partir de informações sobre ventos e correntes, o tipo de óleo derramado e a localização da mancha inicial, se poderia definir qual a trajetória a ser seguida pela mancha e, conseqüentemente, quais as regiões a serem protegidas pelo equipamento existente. O canal abriga, além do terminal, de um porto em São Sebastião, importantes centros de Pesca e de Turismo, "regiões a serem protegidas", portanto.

Para se poder recorrer à citada Equação, foi necessário assumir algumas hipóteses fundamentais. Em primeiro lugar, a fase em que se considera a mancha de óleo. FAY delinea três diferentes comportamentos de uma mancha após um derrame: a primeira denominada pelo autor de fase gravitacional-inercial dura algumas horas, e, em geral é de interesse menor visto que muitos dos acidentes são observados apenas após esta fase, especialmente quando os navios que os causam não querem ser identificados... A segunda fase chamada de difusiva-advectiva vem em seguida e dura até cerca de duas semanas e, no caso de regiões costeiras, é aquela que mais interessa para a modelagem feita neste texto, visando previsões que permitam ações de proteção e limpeza. Há ainda, segundo esse autor, uma terceira fase que ocorre posteriormente, de transporte advectivo e tensão superficial. O estudo desta situação interessa para derrames em alto mar e de longa duração.

Nos casos, portanto, que são objeto do presente texto, usamos a Equação de Difusão-Advecção, e, como nessa fase temos manchas variando de alguns metros quadrados a centenas de quilômetros quadrados e uma espessura que se mede em alguns milímetros, reduz-se, em primeira aproximação, o modelo ao caso bidimensional no espaço:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}.c) - \sigma.c + f(x, y, t), \quad \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0, T].$$

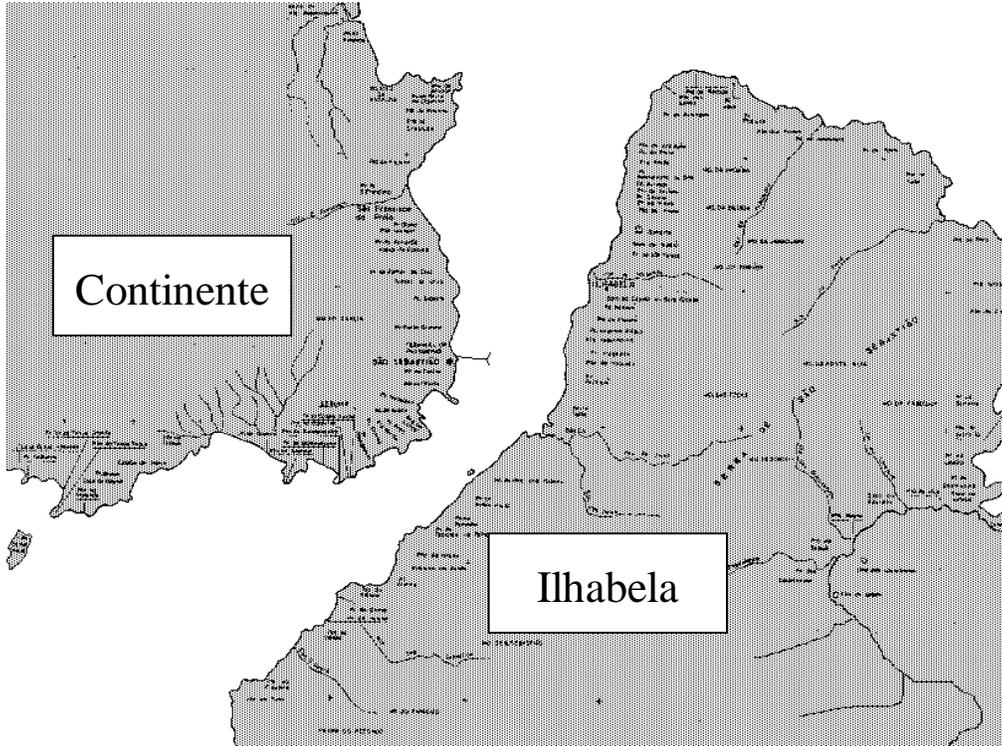


Figura 8: Mapa do Canal de São Sebastião.

com condições de contorno e inicial semelhantes àquelas vistas anteriormente:

$$\begin{aligned}
 c(x, y, 0) &= c_0(x, y), \text{ para } (x, y) \in \Omega, \\
 -\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} &= g_0(x, y, t) \text{ e } c|_{\Gamma_1} = g_1(x, y, t), \text{ ou, ainda} \\
 -\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} &= q \cdot V_n \cdot c \text{ com } \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \partial\Omega,
 \end{aligned}$$

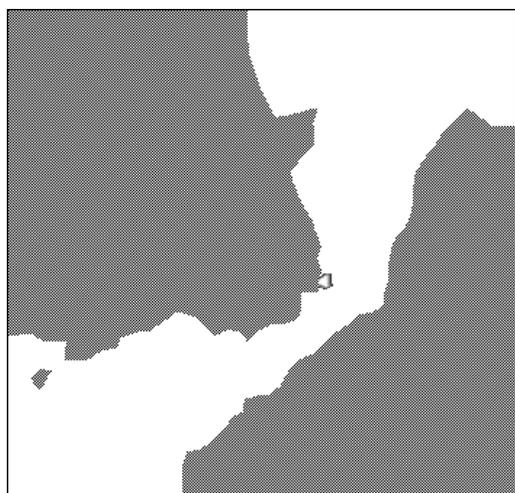
Aqui, condições como as duas primeiras, com $-\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = 0$ e $c|_{\Gamma_1} = 0$ se referem a uma

parte da fronteira de Ω pela qual não há a passagem de poluente e outra parte do contorno suficientemente longe do local estudado como para se poder supor que aí não haverá a presença desse poluente derramado. A terceira condição refere-se à parte da fronteira em que a passagem de poluente depende, por exemplo, da intensidade das correntes, retirando poluente, ou trazendo-o para o domínio em estudo. Uma condição semelhante poderia, numa melhoria do modelo, ser adotada para o poluente que fica retido na região de preamar.

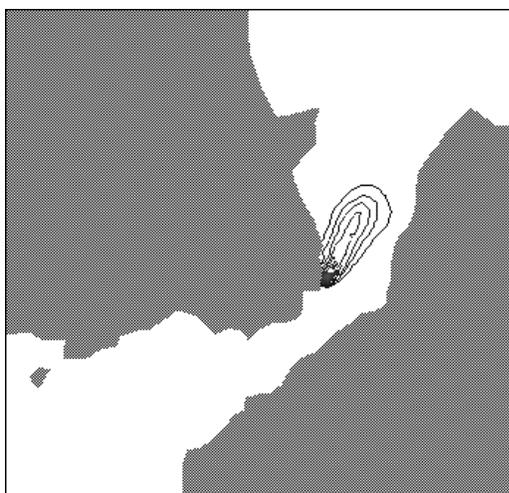
Neste caso, porém, algumas outras diferenças substanciais se destacam. Na equação, o parâmetro da difusibilidade, α , pode variar, conforme outros casos aqui apresentados no espaço e no tempo mas, além disto, pode ser função da própria concentração do poluente, e teríamos $\alpha = \alpha(x, y, t; c)$, enquanto que a degradação, σ , pode, em primeira aproximação permanecer constante, mas pode (e precisa em modelos futuros!) variar no tempo, no espaço e também com a concentração do poluente - e

nem sempre de modo linear: teríamos, também nesta situação, $\sigma = \sigma(x,y,t;c)$. Estas não-linearidades têm sido usadas com compreensível cautela em muitas aproximações: por um lado pelo conhecimento ainda restrito em alguns dos aspectos a serem modelados e, por outro lado, pelas dificuldades numéricas apresentadas. Nos ensaios numéricos a serem apresentados, α e σ são considerados como constantes, embora o vetor da velocidade da corrente marinha varie no espaço: $\mathbf{V} = (V_1(x,y), V_2(x,y))$. A inclusão da maré provocaria uma abordagem um pouco diferente, com $\mathbf{V} = (V_1(x,y,t), V_2(x,y,t))$. Os valores das velocidades foram obtidos interpolando polinomialmente valores descritos relativamente por FURTADO, fazendo uso de uma malha triangular usada para elementos finitos de primeira ordem (com as técnicas de *upwinding* mencionadas acima) ou de segunda ordem. Este trabalho foi desenvolvido por dois alunos de graduação num projeto de iniciação científica, I. A. Paiva e A. L. B. de Oliveira.

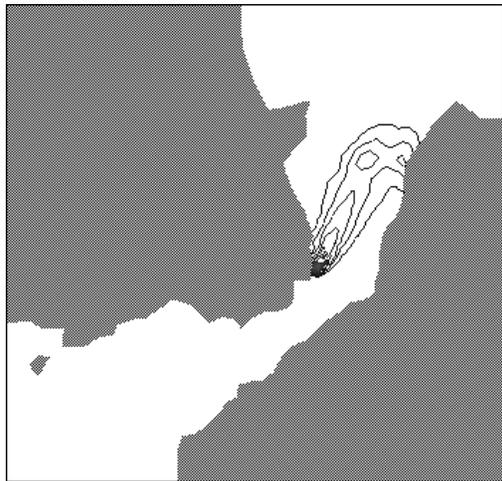
Os resultados apresentados a seguir são fruto do uso de esquemas de aproximação que fazem uso do Método dos Elementos Finitos de Segunda Ordem e de Primeira Ordem com o *upwinding*. No tempo, usou-se o Método de Crank-Nicolson. Técnicas especiais para operar com Matrizes Esparsas se fizeram necessárias. Os resultados numéricos foram transformados em resultados visualmente compreensíveis, do ponto de vista qualitativo, usando um software desenvolvido por L. A. D'Afonseca, estudante do Programa de pós-Graduação do Departamento de Matemática Aplicada do IMECC, da UNICAMP, num trabalho conjunto do doutorando R. F. Cantão e o autor destas notas. Os gráficos produzidos pelas simulações computacionais para descrever o movimento evolutivo da mancha de óleo coincidem em diversas situações com os relatos históricos de acidentes que efetivamente aconteceram na região do canal.



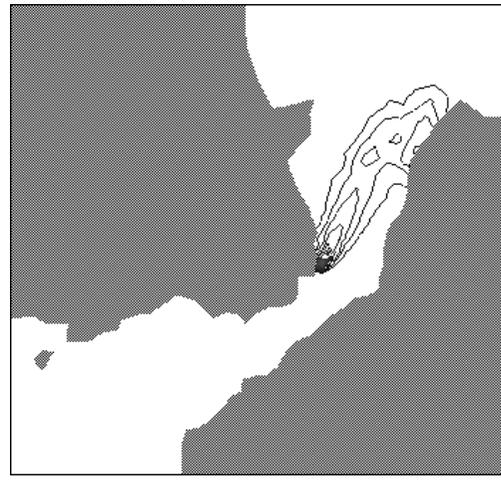
Condição Inicial



2400 iterações

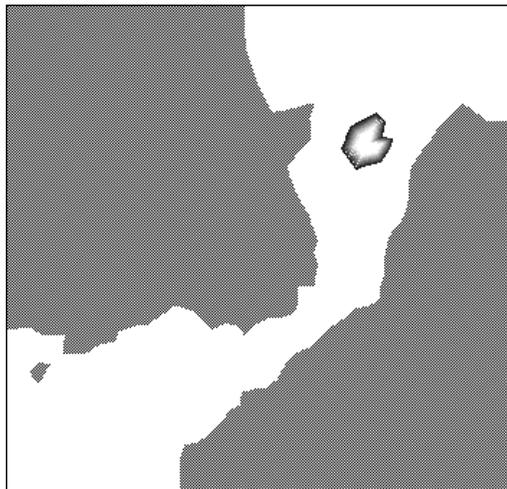


4800 iterações

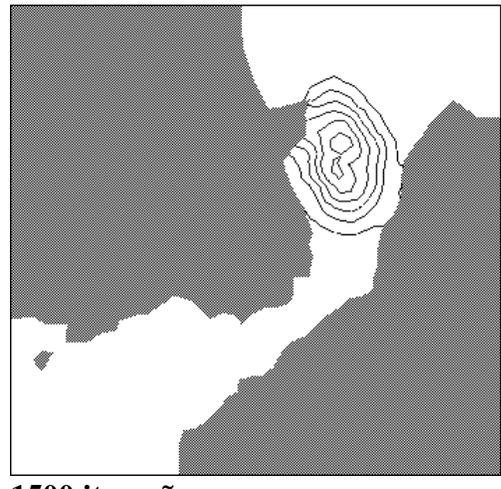


7200 iterações

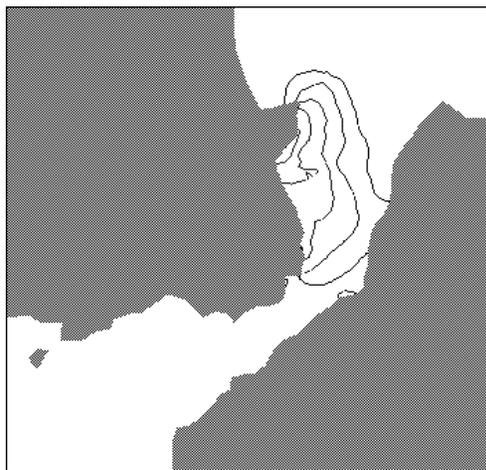
Figura 9: Simulação de vazamento no terminal da Petrobrás (DTCS).



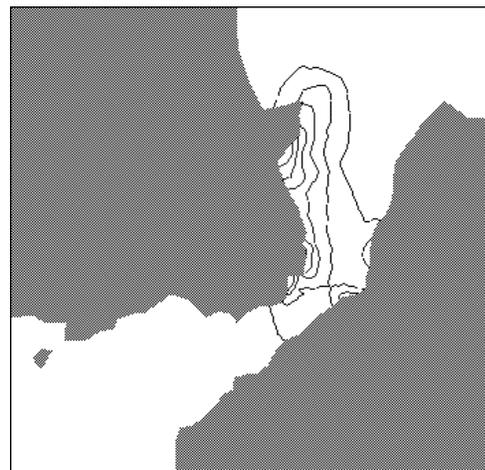
Condição Inicial



1500 iterações



3000 iterações



4800 iterações

Figura 10: Simulação de vazamento na entrada norte do Canal.

Referências Bibliográficas

1. BATSCHELET, E. *Matemática para Biocientistas*, Blüschner, 1989.
2. BECKER, E. B., CAREY, G. F. e ODEN, J. T. *Finite Elements v. 1. An Introduction*, Prentice-Hall, 1981.
3. BECKER, E. B., CAREY, G. F. e ODEN, J. T. *Finite Elements v. 2. A Second Course*, Prentice-Hall, 1981.
4. BENQUÉ, E. J. P., HAUGUEL, A. e VIOLLET, P. L. *In: Engineering Application of Computational Hydraulics*, H. Pitman, 1982.
5. BERNARDES, M. *Poluição em Corpos Aquáticos de Baixa Circulação: Modelagem e Simulação Numérica*, Dissertação de Mestrado, IMECC-UNICAMP, 1998.
6. CANTÃO, R. F. *Modelagem e Simulação Numérica de Derrames de Óleo no Canal de São Sebastião, SP*. Tese de Mestrado. IMECC – UNICAMP.
7. CRANK, J. *The Mathematics of Diffusion*, Clarendon Press, 1985.
8. CUESTA, I., GRAU, F. X. e GIRALT, F. *Numerical Simulation of Oil Spills in a Generalized Domain*. *Oil & Chemical Pollution*, no. 7, pp. 143-159, 1990.
9. EDELSTEIN-KESHET, L. *Mathematical Models in Biology*, Random House, 1987.
10. FAY, J. A. *The Spread of Oil Slicks on a Calm Sea*. *Oil in the Sea*, Plenum Press, pp. 53-63, 1969.
11. HALLAM, T. G. e LEVIN, S. A. *Mathematical Ecology, an Introduction, Biomathematics #17*, Springer, 1986.
12. KARDESTUNCER, H., NORRIE, D. e BREZZI, F. *Finite Element Handbook*, McGraw Hill, 1987.
13. MARCHUK, G. I. *Mathematical Models in Environmental Problems*. North Holland, 1986.
14. MEYER, J. F. C. A. *Derrames de Petróleo em Águas Costeiras: Modelagem Matemática e Simulação Numérica*, in IIIº Simpósio de Ecossistemas da Costa Brasileira, pp. 238-247 - Serra Negra - São Paulo, 1993.
15. MEYER, J. F. C. A., CANTÃO, R. F. e POFFO, I. R. F. *Oil Movement in Coastal Seas: Modelling and Numerical Simulation*, *Oil Spill 98*, Computational Mechanics Publications, pp. 76-87, 1998.
16. MEYER, J. F. C. A. e GEORGES, M. E. R. *Presença de Poluentes em Águas Fluviais: uma Primeira Abordagem*, *Anais do XXI CNMAC*, pp. 36, 1998.
17. MEYER, J. F. C. A. e MISTRO, D. C. *Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the Pollution of Rivers due to Metallic Mercury*, *Panamerican Workshop for Applied and Computational Mathematics*, Annals, 1993.
18. MEYER, J. F. C. A. e PALOMINO-CASTRO, S. E. *Um Problema de Poluição do Ar por Aerossóis: Modelagem Matemática e Simulação Numérica*, in: *A Questão Ambiental: Cenários de Pesquisa*, Textos do NEPAM, pp. 299-309, 1995.
19. MURRAY, J. D. *Mathematical Biology, Biomathematics #19*, Springer, 1989.

20. PIELOU, E. C. *Mathematical Ecology*, Wiley Interscience, 1997.
21. THOMANN, R. V. *Modelling of Toxics in Lakes and Bioaccumulation and Aquatic Food Chains*, Third Autumn Workshop of Mathematical Ecology, ICTP, 1996.