

Relatório Interno – DMA/IMECC – 2004

Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações

J. F. C. A. Meyer ^a

^a*DMA, IMECC – UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.*

J. F. R. Fernandes ^b

^b*DENSIS, FEEC – UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.*

G. L. Diniz ^c

^c*Matemática/ICET – UFMT, 78060-900 – Cuiabá/MT.*

Resumo

Neste relatório, são apresentados os modelos, as aproximações e algumas simulações obtidas pelo código numérico desenvolvido de acordo com a proposta para abordagem do problema da dispersão de poluentes num sistema ar-água, da tese de doutorado de Diniz (2003). Neste caso, o processo ocorre em meios distintos como o aéreo e o aquático. A relevância do trabalho se justifica como um ferramental de estudo para a adoção de políticas de prevenção e/ou proteção ambiental.

Palavras-chave: Dispersão de poluentes, Impacto Ambiental, Elementos Finitos, Simulação Numérica, Difusão-advecção

E-mails: joni@ime.unicamp.br (J. F. C. A. Meyer), jurandir@densis.fee.unicamp.br (J. F. R. Fernandes), geraldo@ime.unicamp.br (G. L. Diniz).

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.

O rápido desenvolvimento industrial, ocorrido na segunda metade do último século, levou ao agravamento dos problemas ambientais, dificultando os esforços de preservação dos sistemas ecológicos. A poluição local, causada pelos emissores industriais em muitas cidades ou regiões, tem superado o valor máximo permitido para uma boa qualidade de vida (Marchuk, 1986). Em alguns casos, é muito pior: têm sido ultrapassados (e muito!) os limites máximos.

Isto reforçou a necessidade urgente de estudos e monitoramento de cenários ambientais, abrindo um promissor campo de trabalho para pesquisadores das mais variadas áreas. Como as questões ambientais estão fortemente interrelacionadas, elas não devem ser tratadas de modo isolado para a busca de soluções viáveis.

Desta forma, a proteção ambiental vem, cada vez mais, ganhando um papel relevante no cenário mundial, principalmente nesta última década, tendo como marcos a realização da Conferência Mundial ocorrida no Rio de Janeiro em 1992 (a chamada Rio-92) e mais recentemente com o chamado Protocolo de Quioto.

É no quadro do estabelecimento de cenários possíveis, em função de políticas adotadas por autoridades regionais no continente sulamericano que se localiza o presente estudo. Será apresentado o problema real e suas modelagens matemáticas, passando de um estudo restrito ao meio aéreo a um sistema ar-água. Em seguida, serão apresentadas as discretizações espacial e temporal dos modelos e, por fim, os resultados das simulações para alguns cenários de dispersão de poluentes.

2 O problema e suas modelagens

Nesta seção será feita a descrição da área de estudo, com um breve relato histórico do “Projeto *Iberá*”, uma apresentação sucinta das características físicas da região e da

sua biodiversidade. Esta descrição apoia-se no texto relativo ao Projeto Iberá, elaborado por Canziani et al. (1998), bem como em Pregnoatto (2002). Por fim, são apresentados modelos matemáticos que descrevem o problema a ser estudado, nas suas formulações clássicas, cujas discretizações serão apresentadas na seção seguinte.

2.1 Breve histórico

Conforme é relatado em Pregnoatto (2002), no início do século passado, houve um movimento da sociedade argentina para a inclusão do parque hidrográfico, denominado *Esteros del Iberá*, no circuito econômico e legal daquele país. Em 1905, este movimento culminou com a organização e realização de uma expedição de reconhecimento, denominada “Expedição Iberá”, proposta pela Sociedade Científica Argentina. À Sociedade coube a elaboração dos objetivos da expedição e a indicação dos responsáveis científicos pelas diferentes áreas temáticas a serem abordadas, cabendo ao governo central o financiamento da expedição.

As questões abordadas nesta expedição se tornaram muito atuais em função de um comentado projeto de hidrovía sulamericana, que possivelmente seria financiado pelo Banco Mundial, com o objetivo de retificar a calha do Rio Paraná, na região de *Iberá*. Com este projeto, buscava-se aumentar a eficiência do transporte fluvial dos grãos produzidos na Macro-bacia do Prata (Pregnoatto, 2002).

Em 1998, durante a realização de um dos Workshops de Ecologia Matemática, realizado no ICTP (Trieste – Itália), discutiu-se a formulação de um projeto no qual se estudassem diversos aspectos e estratégias que contribuíssem para um manejo sustentável na região de pantanal, da Província de Corrientes, no referido *Esteros del Iberá*.

De acordo com Pregnoatto (2002), este projeto recebeu alguns apoios imediatos, tais como: os de pesquisadores em Ecologia Matemática das Universidades de Tandil e Lujan (Argentina), UFRGS (Porto Alegre), UFMG (Belo Horizonte) e de pesquisadores do grupo de Biomatemática da Unicamp. Além destes, também teve o apoio de pesquisadores do Depto. de Ecologia Química da Universidade de Siena e do Instituto Oceanográfico ligado à Universidade de Roma, os quais assumiram a coordenação do projeto.

Outros pesquisadores se agregaram a esta equipe inicial, como os da Universidade de Cádiz (Espanha), de Aveiro (Portugal), de York (Inglaterra) e da Universidad del

Salvador (Buenos Aires). O projeto foi constituído e avaliado de modo relativamente rápido e recebeu o apoio financeiro da Comunidade Européia (Pregnoatto, 2002).

No projeto final, coube ao grupo da Unicamp a modelagem e análise numérica de dois aspectos básicos. Primeiro, o da presença e influência de produtos impactantes nos meios aquáticos, sobre a biota local, devido as atividades antrópicas, particularmente o cultivo de arroz na região circunvizinha. Segundo, o da modelagem e simulação numérica de uma endemia que atinge ciclicamente a população de uma das espécies “carismáticas” da região, a das capivaras (*Hydrochoerus hydrochaeris*).

2.2 Caracterização da área de estudo

A figura 1 mostra uma foto de satélite (GOES-12) com a composição das imagens visível e infravermelho, onde está indicada a localização da região de *Iberá* e a figura 2 mostra uma vista aérea de parte de *Esteros del Iberá*, onde se vêem os canais de captação de água dos esteros para os arrozais correntinos.

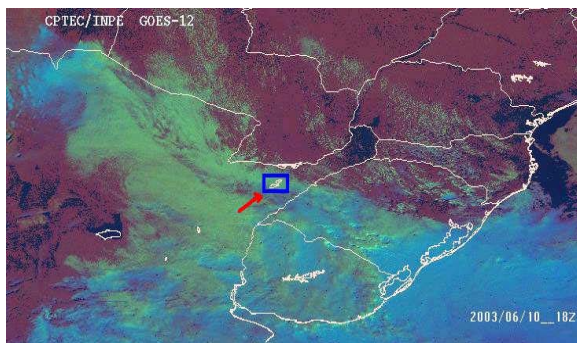


Figura 1. Foto de satélite com a região de *Iberá*,



Figura 2. Vista aérea de uma parte de *Esteros del Iberá* (Foto: J.F.C.A. Meyer)

Os *Esteros del Iberá* se localizam na região nordeste da Argentina (fig.1) entre os paralelos $27^{\circ} 35'$ e $28^{\circ} 41'$ sul e os meridianos $58^{\circ} 58'$ e 60° a oeste de Paris (Pregnoatto, 2002). Esta região ocupa boa parte da província de Corrientes, sendo parte integrante da Bacia do Prata. A dinâmica trófica e hídrica de *Iberá* não habilita a região a ser classificada como um sistema pantanoso tropical, mas como eutrófico* temporário ou semipermanente, semelhante aos sistemas que ocorrem na bacia do Prata (Canziani et al., 1998).

* Ambientes produtivos, com abundância de nutrientes, cf. Odum (1988) – pg. 91.

Iberá é abastecido, em boa parte, por aportes pluviométricos diretamente ou através do escoamento superficial ou subsuperficial (*runoff*), ao longo de uma bacia de captação que supera os 13.000 km². Apresenta um regime de flutuação hidrométrica gradual e estacionária, com baixa circulação de água em razão do relevo quase plano e do abundante tamponamento por macrófitas (Canziani et al., 1998).

A profundidade média das lagoas, canais e esteros oscila entre 2 e 3 metros, com uma variação anual em seu nível de aproximadamente 1 metro. Os registros mais profundos são de até 4 metros, que correspondem às partes mais profundas de alguns canais ou lagoas. O lago de *Iberá* apresenta uma profundidade média de cerca de 3 metros, com um leito completamente plano de pouquíssimos micro-relevos.

Este sistema sustenta algumas espécies de fauna vulnerável e ameaçada, sendo considerado um ecossistema extremamente frágil e sensível a perturbações de acordo com o tratado de Ramsar[†]. É um sítio com alta diversidade biológica, contendo um número apreciável de espécies endêmicas, possui uma porção representativa dos habitats da região e abriga elementos característicos da região biogeográfica.

Registram-se cerca de 81 espécies de peixes para o macrosistema geral, com uma importante avifauna em torno de 200 espécies, características dos alagados. Se destacam pelo menos 3 famílias de anfíbios (Hilidae, Leptodactylidae e Pseudidae). Entre os mamíferos destacam-se o cervo pantaneiro (*Blastoceros dichotomus*), a lontra (*Lutra longicaudis*) e a capivara (*Hydrocoerus hydrochaeris*). A fauna de répteis é caracterizada por grande abundância de jacarés (*Caiman yacare* e, em menor grau, *Caiman latirostris*, Canziani et al. (1998)).

O lago de *Iberá* e os riachos que dele partem constituem outra importante unidade de paisagem que cobrem cerca de 5.500 hectares. Nele, são encontradas comunidades de plantas submersas instaladas nas águas profundas e claras, nas áreas protegidas de vento das lagoas e dos leitos dos riachos. Chegam a formar pradarias submersas ocupando uma área de até 50% de seu leito, onde ocorrem os gêneros *Egeria*, *Cabomba* e *Ultricularia*. Sobre estas pradarias estruturam-se comunidades bióticas complexas, que sustentam grande parte das redes tróficas do sistema (Canziani et al., 1998).

[†] O tratado de terras inundadas, assinado em Ramsar, Irã, em 1971, é um tratado intergovernamental que fornece a estrutura de ação nacional e cooperação internacional para a conservação e uso racional de áreas alagáveis e seus recursos. Para mais informações ver: <http://www.ramsar.org/>.

A temperatura média anual na região é de 21°C , com médias mensais indo dos 16°C em junho/julho aos 27°C em janeiro/fevereiro. As máximas absolutas chegam aos 44°C , com mínimas de -2°C . A umidade relativa é elevada, com mínimas de 60%, no período de seca, e máximas no período das chuvas que superam os 75%.

As chuvas oscilam entre 1.200 e 1.500 mm anuais, mas estes valores podem variar periodicamente, cuja evapo-transpiração é de 1.040 mm (média anual). Não existe uma estabilidade hídrica nítida, não obstante registram-se chuvas pronunciadas, principalmente na primavera e outono.

Em relação ao manejo, observa-se a extração de água para irrigar os arrozais da região circunvizinha, mas que tem diminuído em razão da situação econômica por que passa a Argentina. Das atividades agrícolas, as mais desenvolvidas são o cultivo de arroz e as atividades silvícolas.

Especificamente, não vêm sendo aplicadas as Diretrizes do Uso Racional de Terras Inundadas de Ramsar, nem suas Orientações Adicionais. Entretanto, existe um plano de manejo integrado do macrosistema, elaborado na província, ainda que não tenha sua aplicação plena.

Segundo denunciou a Fundação Mundial para a Vida Silvestre (WWF), a região estaria sofrendo um processo de inundação, por infiltração subterrânea, devido a represa de Jaciretá. Cabe ressaltar que, apesar disso, este sistema ainda está pouco alterado, mesmo com as atividades humanas nas suas proximidades, daí a importância deste projeto.

2.3 O modelo matemático

Para se ter uma primeira noção do processo de transporte e transformação dos poluentes no meio ambiente, é apresentada a figura 3, a seguir, adaptada de Connel e Miller (1984). Este processo está relacionado com:

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

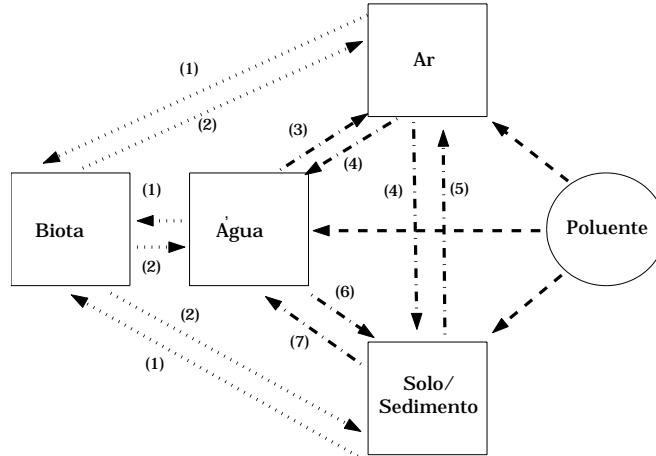


Figura 3. Processo de transporte e transformação do poluente

- (1) Bioacumulação; (2) Excreção/Secreção; (3) Evaporação; (4) Precipitação;
 (5) Volatilização; (6) Absorção e (7) Diluição.

Em geral, o tratamento do problema da poluição tem sido considerado somente de modo isolado em cada um dos compartimentos indicados na figura 3, isto é, no ar ou na água ou na biota ou nos solos/sedimentos.

Neste sentido, o presente trabalho procura levar em consideração, senão de forma completa, pelo menos boa parte dos processos indicados pelo diagrama da figura 3.

Na descrição dos modelos que serão apresentados a seguir, haverá uma distinção entre dois tipos de poluentes, seja devido à densidade ou à solubilidade, a saber:

- (i) aqueles que não penetram na água e
- (ii) aqueles que penetram na água.

2.3.1 No meio aéreo

Na primeira parte deste estudo, 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 4.

[‡] Usa-se, no escopo deste estudo, a terminologia local de lagoa ou baía no sentido de indicar corpos aquáticos de baixa circulação, como ocorre em *Iberá* e no pantanal matogrossense.

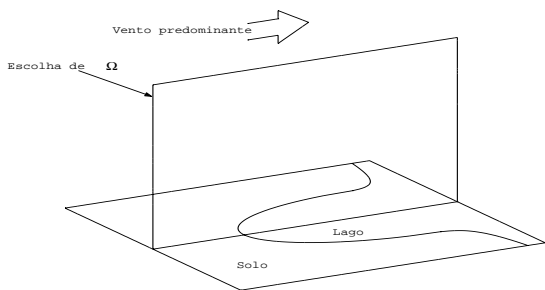


Figura 4. Escolha do domínio para estudo.

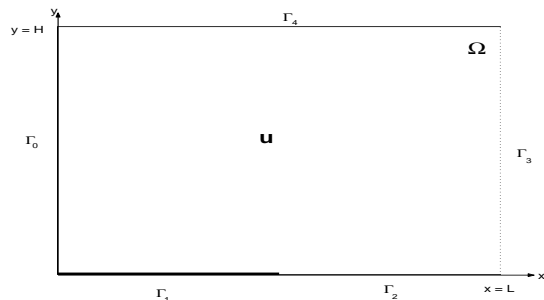


Figura 5. Domínio $\Omega = (0, L) \times (0, H) \subset \mathbb{R}^2$.

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

No modelo deverão ser considerados os fenômenos de difusão efetiva (ou dispersão, conforme Okubo (1980)), o transporte advectivo, os diversos fenômenos de decaimento aproximados em conjunto, as possíveis fontes poluidoras e a troca entre os meios aéreo e aquático no caso (ii).

Assim, chamando de $u(x, y, t)$ a concentração do poluente no ponto (x, y) para o instante t , o modelo é descrito, de forma genérica, por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \left\{ \begin{array}{l} \text{processo} \\ \text{evolutivo} \\ \text{de difusão} \end{array} \right\} - \{ \text{transporte} \} - \left\{ \begin{array}{l} \text{fenômenos de} \\ \text{decaimento} \end{array} \right\} + \{ \text{fonte} \}$$

Em termos de modelagem clássica destes fenômenos, tem-se:

$$\{ \text{difusão} \} = \text{div} [-\alpha_u \nabla u] \quad (\text{cf. Okubo (1980)});$$

$$\{ \text{transporte} \} = \text{div} [\vec{W} \cdot u] \quad (\text{cf. Edelstein-Keshet (1988)});$$

$$\{ \text{decaimento} \} = \text{cte} \cdot u = \sigma_u u \quad (\text{cf. Bassanezi (2002)})$$

Finalmente, em termos da modelagem da fonte, será considerada ora sua ausência, ora fontes pontuais (o fenômeno de *runoff* – escoamento – indica uma fonte pontual na margem do corpo aquático, no ponto (x_L, y_L) da fig. 6) ou ainda o ingresso de poluentes no domínio considerado, por deriva.

Resulta, portanto, que a equação que modela o processo de dispersão efetiva do poluente no domínio aéreo indicado na figura 5 e descrito acima, é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}(\alpha_u \nabla u) - \operatorname{div}(\vec{W} u) - \sigma_u u + f, \quad (2.1)$$

$$\text{onde } \left\{ \begin{array}{ll} \alpha_u = \alpha_u(x, y, t), & \text{aproxima a difusibilidade efetiva no ar,} \\ \vec{W} = \langle v_1(x, y, t); v_2(x, y, t) \rangle & \text{com} \\ \operatorname{div}(\vec{W}) = 0 & \text{aproximando um campo suficientemente "bem} \\ & \text{comportado" no sentido dos fluxos aéreos,} \\ \sigma_u & \text{aproxima o parâmetro de proporcionalidade} \\ & \text{linear do decaimento total no meio aéreo,} \\ f & \text{é o termo fonte.} \end{array} \right.$$

Desta forma, o domínio[§] Ω (descrito pela figura 5) a ser considerado neste problema de valor de contorno (Lions, 1961), terá as condições de contorno de diversos tipos genericamente indicadas por:

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = g; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 u; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = 0; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} = 0 \text{ e } u \Big|_{\Gamma_4} = 0 \quad (2.2)$$

Γ_3 indica uma fronteira suficientemente distante de modo que o comportamento, relativamente ao espaço, possa ser considerado assintoticamente estacionário, ou que o balanço entre o que sai e o que entra por esta parte da fronteira seja nulo, enquanto Γ_4 caracteriza um trecho da fronteira, a uma altura longe o bastante da fonte de modo que não se registre a presença de poluente nessa região.

2.3.2 Inclusão do Meio Aquático

Em segunda aproximação, inclui-se o meio aquático e a interação entre os meios, no caso de substâncias poluentes que penetrem na água ou saiam desta para o ar. Nestes casos, além da concentração de poluente no ar, indicada por $u(x, y, t)$, será designada por $a(x, y, t)$ a concentração do poluente na água no ponto (x, y) , para o instante t , na parte do domínio a ser considerada (ver figura 6).

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

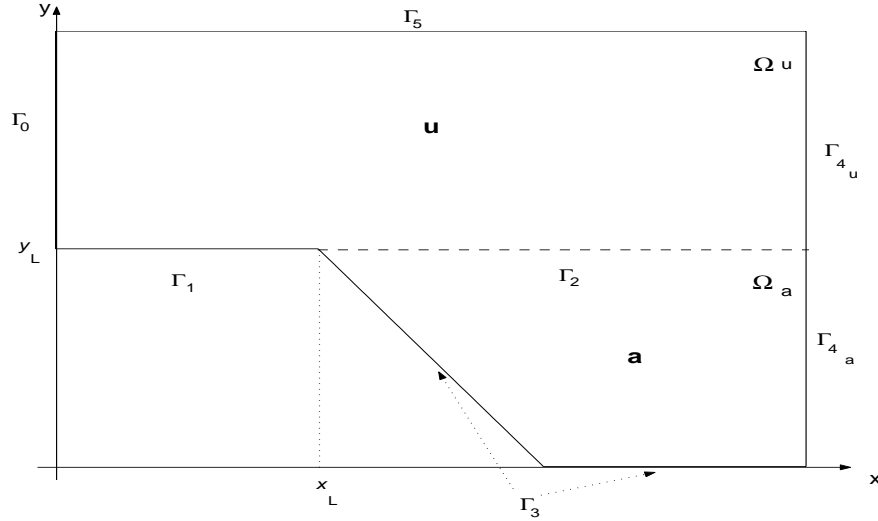


Figura 6. Incluindo o meio aquático no domínio de estudo

Como no modelo anterior para o ar, em termos gerais, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & - \{ \text{difusão} \} - \{ \text{transporte} \} - \{ \text{decaimento} \} + \{ \text{fonte} \} \\ & + \{ \text{poluente proveniente do meio aquático} \} \\ & (\text{ou : } - \{ \text{poluente indo do ar para a água,} \}) \end{aligned}$$

sendo este último termo o que diferencia esta equação de (2.1), enquanto que no meio aquático, a taxa de variação da concentração do poluente $a(x, y, t)$, pode ser genericamente designada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} = & - \{ \text{difusão} \} - \{ \text{transporte} \} - \{ \text{decaimento} \} + \{ \text{fonte} \} \\ & + \{ \text{poluente proveniente do meio aéreo} \} \\ & (\text{ou : } - \{ \text{poluente indo da água para o ar.} \}) \end{aligned}$$

O que se obtém, então, é o sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \text{div}(\alpha_u \nabla u) - \text{div}(\vec{V} u) - \sigma_u u + f, \\ \text{e} \\ \frac{\partial a}{\partial t} = \alpha_a \Delta a - \text{div}(\vec{W} a) - \sigma_a a + \mathcal{F}, \end{cases} \quad (2.3)$$

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

Pode-se observar que o movimento de poluente do meio aéreo para o aquático, ou vice-versa, não figura no sistema (2.3) acima, já que ocorre na fronteira entre os dois meios, aparecendo como parte das condições de contorno, cujas expressões são, portanto:

$$\begin{aligned} -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} &= g; & -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} &= k_1 u; & -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} &= \beta_{12}(u - a) \Big|_{\Gamma_2}; & -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4_u}} &= 0; \\ -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} &= k_3 a; & -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4_a}} &= 0; & -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} &= \beta_{21}(a - u) \Big|_{\Gamma_2} & \text{e} & u \Big|_{\Gamma_5} = 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Finalmente, o termo \mathcal{F} presente em (2.3), irá descrever a fonte do meio aquático existente precisamente na intersecção dos meios aéreo com o aquático e em contato com o solo: o escoamento no ponto $P = (x_L, y_L)$. Esta fonte será modelada por:

$$\mathcal{F} = \begin{cases} A_0 e^{-\kappa t} & \text{se } (x, y) = (x_L, y_L) \\ 0 & \text{se } (x, y) \neq (x_L, y_L) \end{cases} \quad \forall t \in [0, T], \quad (2.5)$$

Esta escolha de \mathcal{F} se deu considerando que haja um acúmulo do poluente na fronteira Γ_1 e que o mesmo seja transportado pelos canais de drenagem e/ou afluentes até o ponto de descarga no meio aquático – ponto (x_L, y_L) do domínio – tal como o efeito *runoff*, no caso de campos de cultivo de arroz em várzea (ver figura 2), comum em áreas alagáveis (Soderquist et al., 1977).

Estas equações constituem a chamada formulação clássica ou “forte” do problema. No entanto, devido a necessidade de demonstrar a existência e unicidade de solução do problema e, além disso, visando a aplicação do método de Elementos Finitos, via Petrov/Galerkin para a discretização espacial, de modo a obter as aproximações numéricas adequadas da solução em cada instante $t \in [0, T]$, faz-se necessária a obtenção da formulação variacional ou “fraca” do problema, feita para os dois casos, a seguir.

3 A formulação fraca dos problemas

Na abordagem do problema, deveremos obter então a formulação variacional para as equações 2.1 e 2.3 apresentadas na seção anterior em sua formulação clássica. Proporemos uma “solução fraca” ou no sentido de distribuições, em função da opção de aproximação pelo Método dos Elementos Finitos, via Método de Galerkin.

A formulação variacional do modelo consiste em obter uma outra formulação das equações (2.1–2.2) e (2.3–2.4), cujas soluções, denominadas soluções fracas, devem ser procuradas num espaço conveniente. A justificativa de tal procedimento está na possibilidade de se poder usar funções que comportem condições de menos regularidade, para diversos aspectos relativos ao fenômeno, ao domínio ou às condições inicial e de contorno.

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

- (1) Considerar as derivadas de 2.1–2.2 e 2.3–2.4 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

$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \left\{ \nu(x, y) \in \mathcal{L}^2(x, y) : \frac{\partial \nu}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial \nu}{\partial y} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \right\},$$

que será denotado por \mathcal{U} (caracterizado mais adiante), onde \mathcal{L}^2 é o espaço das funções de quadrado integráveis, no sentido de Lebesgue. Em \mathcal{H}^1 bem como no subespaço \mathcal{U} , o produto interno é definido da seguinte forma:

$$\left(f \middle| g \right)_{0;\Omega} := \iint_{\Omega} f \cdot g \, d\mu; \quad (3.6)$$

$$\left\langle f \middle| g \right\rangle_{0;\Gamma} := \int_{\Gamma} f \cdot g \, d\gamma. \quad (3.7)$$

com a integração feita, como já citado, no sentido de Lebesgue.

Neste caso, iremos procurar soluções $u(\mathcal{X}, t)$ e $a(\mathcal{X}, t)$, num espaço \mathcal{V}_k , dado por:

$$\mathcal{V}_k = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2\left((0, T], \mathcal{U}\right) : \left(\begin{array}{l} \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \text{ e } \nu = 0 \\ \text{em parte de } \Gamma(\Gamma_4 \text{ ou } \Gamma_5) \end{array} \right), \forall t \in [0, T] \right\}$$

3.1 No meio aéreo: poluentes que não penetram na água

Neste primeiro caso, para obtermos a formulação fraca do problema, vamos supor uma variação linear crescente no coeficiente de difusão no meio aéreo, ou seja:

$$\alpha_u(y) = \alpha_0 + \alpha_1 y, \quad \alpha_1, \alpha_0 > 0 \quad ; \quad y \in [0, Y]$$

onde α_0 é a difusibilidade efetiva do meio aéreo bem próximo ao solo e \vec{W} dado por:

$$\vec{W} = \langle V_1\sqrt{y}; -V_2 \rangle$$

sendo que $V_1\sqrt{y}$ representa uma primeira aproximação do campo de velocidade para a componente horizontal do vento predominante (no transporte por deriva). E, nesta primeira abordagem, V_2 é considerado constante (V_2 é, muitas vezes, chamada de velocidade limite de queda) para a componente vertical da velocidade resultante da ação gravitacional. Conforme Figueiredo (1979), supondo que a resistência do ar seja linearmente proporcional à velocidade obtém-se a aproximação assintótica constante indicada por (V_∞).

Após a multiplicação pela função teste e integrando no sentido de Lebesgue sobre Ω , a equação 2.1, junto com as condições de contorno (2.2), se torna:

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left(\nabla u \cdot \nabla \nu \right) d\mu - \iint_{\Omega} V_2 \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu \\ & + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu + \int_{\Gamma_1} k_1 u \nu d\gamma - \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma = 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

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

3.2 Nos dois meios: poluentes que penetram na água

No caso dos poluentes que afetam ar e água, tem-se uma reformulação do domínio, conforme aquele apresentado na figura 6 (pag.10), bem como em novas condições de contorno, estabelecidas pelas equações (2.4). Analogamente ao que foi feito para o caso anterior, para a formulação fraca do sistema (2.3–2.4), é necessário definir novas funções teste e novos espaços. Neste caso, a formulação fraca será dada pelo sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l}
\iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\
-V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \\
= \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\
\\
\iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu \\
+\sigma_a \iint_{\Omega_a} a \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + k_3 \int_{\Gamma_3} a \nu d\gamma \\
= \iint_{\Omega_a} \mathcal{F}_{\delta_L}(\Omega_a) \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T]
\end{array} \right. \quad (3.9)$$

4 Discretização do modelo

Visando as aproximações das soluções de (3.8) e (3.9) pelo Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal), a opção anterior pela formulação fraca é reforçada. Este processo envolve também outras estratégias.

O primeiro passo da discretização espacial, para usar o Método dos Elementos Finitos poderá exigir, conforme a situação, o recurso de técnicas do tipo Petrov/Galerkin, em função de características hiperbólicas que poderão se sobrepor àquelas parabólicas do sistema (3.9).

Neste esquema de aproximação, deve-se trabalhar com a formulação variacional discreta do problema, a ser dada por novas equações do tipo (3.8), para o primeiro caso, e (3.9), para o segundo caso. Denominando \mathcal{V}_{h_k} a um subespaço conveniente de \mathcal{V}_k , gerado por N_{h_k} funções φ_i (chamadas de funções teste), iremos propor novos problemas (3.8) e (3.9) nestes espaços \mathcal{V}_{h_k} em vez de \mathcal{V}_k , onde $\forall \nu_{h_k} \in \mathcal{V}_{h_k}$ é da forma:

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

4.1 Primeiro caso: poluentes que não penetram na água

No primeiro caso, 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. (3.8) pode ser reescrita na forma do seguinte sistema:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left(\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \right) d\mu \\
& + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\
& + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma = \\
& = \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \iint_{\Omega} \left(f \varphi_i \right) d\mu \quad \forall \varphi_i \text{ da base de } \mathcal{V}_{h_1}
\end{aligned} \tag{4.10}$$

o que, mediante a escolha indicada anteriormente, nos fornece o seguinte sistema de EDO's discretizado:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \left\{ \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left(\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \right) + V_1 \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu \right. \\
& \left. + \iint_{\Omega} \sigma_u \varphi_j \varphi_i - V_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \right\} = \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \iint_{\Omega} \left(f \varphi_i \right) d\mu \\
& \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \forall \varphi_i \text{ da base de } \mathcal{V}_{h_1}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

ou seja, tem-se uma EDO do tipo

$$\mathbb{A} \frac{du}{dt} + \mathbb{B}u = f$$

A discretização seguinte é a da variável temporal, isso será feito pelo método de Crank-Nicolson, fazendo as seguintes aproximações usuais:

$$\frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \quad \text{onde} \quad u_j^{n+1} \text{ aproxima } u_j(t_{n+1}) \text{ e} \tag{4.12}$$

$$u_j\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) \cong \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \quad (4.13)$$

daí, levando (4.12) e (4.13) em (4.10), obtém-se o sistema linear

$$\mathcal{A}u^{(n+1)} = \mathcal{B}u^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}, \quad \text{dado} \quad u^{(0)} \quad (4.14)$$

onde

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2}\sigma_u\right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i d\mu \\ &\quad + V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu - V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ b_{ij} &= \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\sigma_u\right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu - \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i d\mu \\ &\quad - V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu + V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu - k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ d_i^{n+\frac{1}{2}} &= \iint_{\Omega} f\left(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot\right) \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g\left(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot\right) \varphi_i d\gamma \\ (u^{(0)}|\varphi_i) &= \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j^{(0)}(\varphi_j|\varphi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N_{h_1} \end{aligned}$$

A ordem das aproximações temporais é, localmente, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

A escolha das funções teste φ_i será a de elementos finitos triangulares de primeira ordem, implicando numa aproximação local da ordem de $(\Delta x)^2$.

4.2 Segundo caso: poluentes que não penetram na água

Na discretização do modelo proposto para o segundo caso, onde o processo de dispersão ocorre em ambos os meios, pode-se seguir o procedimento adotado no caso anterior. Neste caso também, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada pelo sistema (3.9).

Como o processo de dispersão ocorre em ambos os meios, será feita uma discretização dos domínios aéreo e aquático (Ω_u e Ω_a , respectivamente), considerando agora os subespaços $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ de \mathcal{V}_{2u} e \mathcal{V}_{2a} , respectivamente, gerados pelas $N_{h_{2u}}$ e $N_{h_{2a}}$ funções φ_i (chamadas de funções teste) – cada um destes espaços para a aproximação da concentração do poluente, por variáveis separáveis, num dos meios.

Assim, qualquer $\nu_{h_{2\bullet}} \in \mathcal{V}_{h_{2u}}$ ou $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ pode ser escrita na forma:

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

Daí, considerando os subespaços $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ de \mathcal{V}_{2u} e \mathcal{V}_{2a} , tem-se para o sistema (3.9):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mu \\ + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ = \iint_{\Omega_u} f \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2u}} \\ \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} \frac{da_j}{dt} \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + \alpha_a \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mu \\ + W_1 \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - W_2 \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ + \sigma_a \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_3 \sum_{j \in \Gamma_3} a_j \int_{\Gamma_3} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \varphi_i d\mu + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Novamente, via o método de Crank-Nicolson com diferenças centradas, obtém-se o sistema linear acoplado:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dots \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_a \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\ \left. \left. + W_1 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + k_3 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} + \beta_{21} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\ - \frac{\beta_{21} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j^{(n+1)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \\ = \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_a \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\ \left. \left. + W_1 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + k_3 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} + \beta_{21} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\ + \frac{\beta_{21} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j^{(n)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} + \left(\mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}} \end{array} \right\}$$

Denominado \mathbb{U} o vetor coluna com $N_{h_{2a}}$ e $N_{h_{2a}}$ elementos formado pelos respectivos vetores colunas $u_{h_{2a}}$ e $a_{h_{2a}}$, ou seja,

$$\mathbb{U} = \begin{bmatrix} u_{h_{2a}} \\ a_{h_{2a}} \end{bmatrix}$$

o sistema de equações lineares algébrico (4.17) pode ser escrito de maneira mais compacta na forma matricial:

$$\mathcal{A} \cdot \mathbb{U}^{(n+1)} = \mathcal{B} \cdot \mathbb{U}^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}} \quad \text{dado } \mathbb{U}^{(0)} = \begin{bmatrix} u^{(0)} \\ a^{(0)} \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

5 Estudo de estabilidade

Os métodos de aproximação numérica para a solução de equações evolutivas denominadas “de transporte”, como as apresentadas nos modelos para este problema, podem trazer sérias dificuldades, usualmente devido à componente advectiva, quando ela é ou se torna preponderante na equação.

Isto pode ser testado pela simples comparação entre os parâmetros \vec{W} e α_u ou \vec{W} e α_a . Naqueles casos em que \vec{W} é bem maior que α_u ou $\vec{W} \gg \alpha_a$, certamente aparecerão oscilações numéricas numa aproximação clássica, quando o tamanho da malha excede um valor crítico (Heinrich et al., 1977). Em mecânica dos fluidos, problemas semelhantes aparecem com relação à componente convectiva da equação de Navier-Stokes.

A principal razão destes problemas é que a matriz associada ao termo convectivo/advectivo é não simétrica, podendo gerar sistemas mal-condicionados (Moreira e Wrobel, 1983). Uma maneira de suprimir tais fenômenos é usar malhas bem refinadas, de maneira que a convecção/advecção perca sua preponderância a nível de elemento. Entretanto, tal estratégia tem um custo operacional alto, pois com uma malha mais refinada a ordem do sistema obtido deverá ser bem maior, o que torna o sistema mais pesado do ponto de vista computacional, além de provocar a perda de flexibilidade na malha – uma vantagem evidente do Método dos Elementos Finitos.

Nas simulações apresentadas na seção seguinte, a escolha dos parâmetros de discretização levou em conta a condição de estabilidade do método, com base no número de Peclet (Brooks e Hughes, 1982; Heinrich et al., 1977; Christie et al., 1976). Esta condição é dada por:

$$\frac{V_i \Delta x_i}{\alpha} \leq 2 \quad (5.19)$$

onde

V_i é a componente do termo advectivo \vec{V} na direção x_i
 Δx_i é o comprimento máximo do intervalo na direção x_i
 α é o coeficiente de difusão.

Outro critério, utilizado nos casos de advecção transiente (com o coeficiente de difusão nulo), é a condição dada pelo número de Courant (Brooks e Hughes, 1982), que estabelece:

$$\text{Cr} = \frac{V_i \Delta t}{\Delta x_i} \leq 2 \quad (5.20)$$

No problema em estudo, este critério não se aplica, uma vez que o coeficiente de difusão apesar de ser pequeno, é sempre diferente de zero, exceto para o mercúrio metálico, cujo coeficiente de difusão é tão pequeno que pode ser considerado como nulo (Mistro, 1992).

6 Resultados numéricos

Nas simulações apresentadas adiante, alguns dos parâmetros utilizados foram encontrados na literatura, entretanto, dado o caráter inédito do modelo proposto, muitos dos

parâmetros tiveram de ser estimados, dentro de espectros presumidamente plausíveis, para simulação de cenários e teste dos códigos numéricos desenvolvidos.

Neste sentido, os resultados apresentados a seguir servem mais para efeito de teste dos modelos, mesmo considerando a busca de uma abordagem o mais realista possível.

Nestas simulações, a principal característica que merece ser ressaltada é sua visualização através de gráficos, cuja compreensão é bem mais fácil. Uma vez que o problema de dispersão de poluentes tem despertado o interesse de pesquisadores das mais variadas áreas, bem como de organizações não-governamentais ligadas aos problemas ambientais, cujo caráter interdisciplinar é inquestionável, essa visualização se torna essencial.

Os códigos foram desenvolvidos para utilização no ambiente do MATLAB®, cuja facilidade de interface gráfica, permite a obtenção de animações que descrevem o processo evolutivo de dispersão do poluente no domínio discretizado, para um determinado período de tempo previamente escolhido.

6.1 Simulação de cenário no caso da dispersão só no meio aéreo

A simulação do cenário 1 foi obtida considerando a discretização do domínio aéreo mostrado na fig.5 (pg.8). A estimativa da condição inicial foi feita com base na dosagem das aplicações de pesticidas pelos agricultores da região de *Iberá* e supondo que não há fontes no interior do domínio.

Neste caso, considerou-se uma difusão moderada e a predominância de ventos fracos, ou melhor, com velocidade média inferior 5 km/h. Daí, foi feita a simulação para um cenário caracterizado pelos parâmetros constantes da tabela 1, com $\Delta x = 0,2$ km, $\Delta y = 0,125$ km e $\Delta t = 0,025$ horas, cujos resultados estão apresentados nos gráficos da fig. 7.

No cenário 2, apresentado nas figuras 9 e 10, foram utilizados os parâmetros apresentados na tabela 2, cujos parâmetros de discretização foram: $\Delta x = 0,02$ km, $\Delta y = 0,04$ km e $\Delta t = 0,005$ horas.

Tabela 1. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 1

Parâmetros do modelo	Valores	Unidades
α_0	0,1	km ² /h
α_1	0,01	km/h
σ_u	0,001	h ⁻¹
V_1	2,0	km/h
V_2	0,01	km/h
k_1	0,01	km/h
g_0	0,005	l/(km.h)

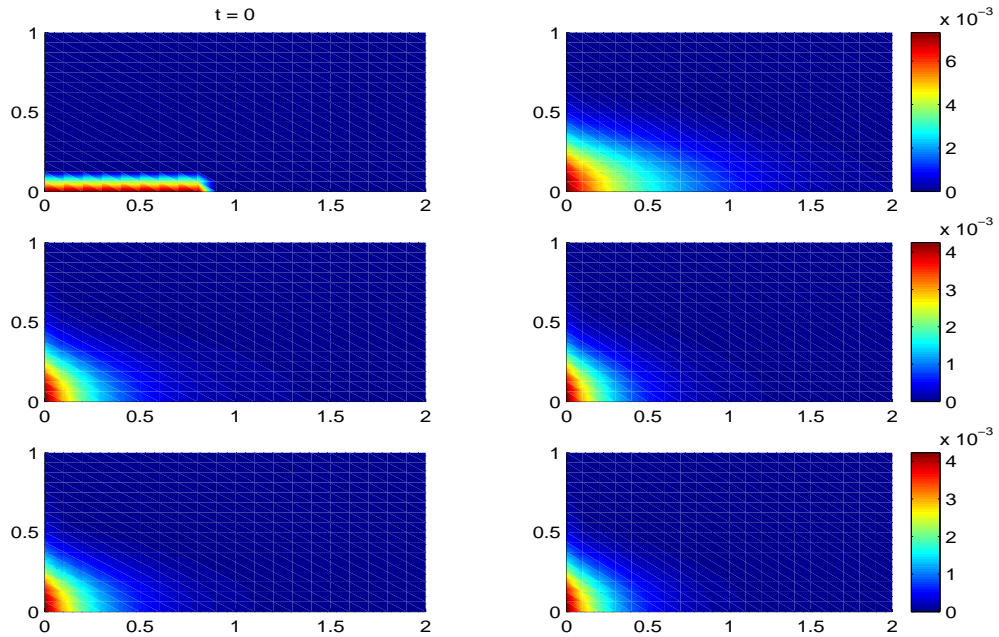


Figura 7. Simulação do cenário 1 - vento fraco e difusão moderada – N^o de Peclet = 0,6452

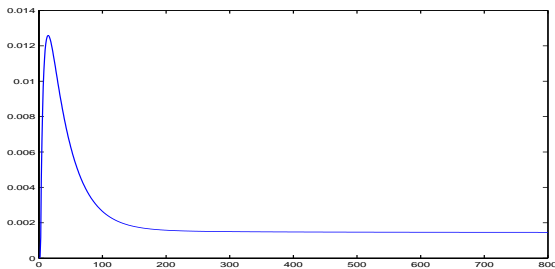


Figura 8. Concentração para o nó (x;y) = (0,1;0,1875) ao longo do tempo no cenário 1

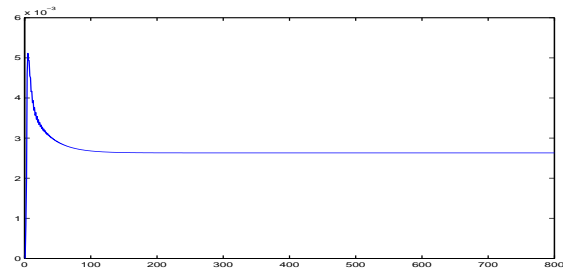


Figura 9. Concentração para o nó (x;y) = (0,04;0,04) ao longo do tempo no cenário 2

6.2 Simulação para a dispersão nos meios aéreo e aquático

Para o caso de poluentes que se movimentam em ambos os meios, o domínio considerado para a discretização é como aquele mostrado na fig.6. Este domínio foi

Tabela 2. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 2

Parâmetros do modelo	Valores	Unidades
α_0	0,15	km ² /h
α_1	0,01	km/h
σ_u	0,0001	h ⁻¹
V_1	12,0	km/h
V_2	0,9	km/h
k_1	0,005	km/h
g_0	0,02	l/(km.h)

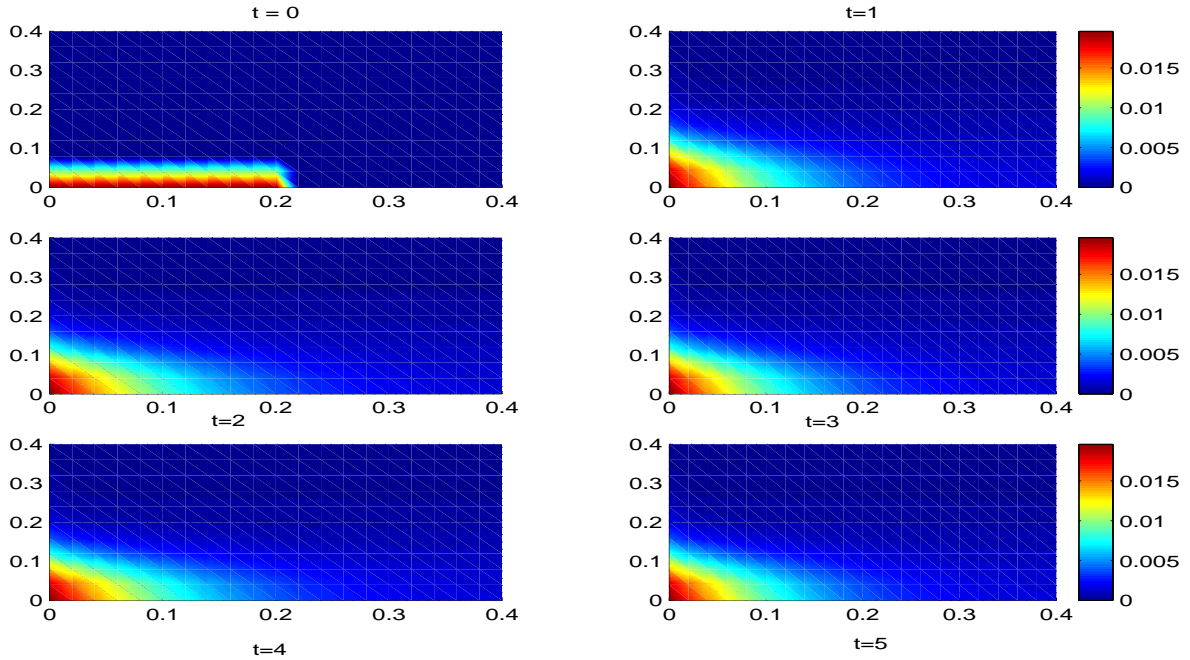


Figura 10. Simulação do cenário 2 - vento moderado e difusão moderada – N^{de} de Peclet = 1,558

escolhido com alguma regularidade de forma a simplificar os códigos implementados, para testar o modelo e o código de modo mais efetivo.

A simulação do cenário 3, foi feita com a mesma estimativa da condição inicial apresentada nas simulações anteriores. Além disso, a fonte no domínio foi suposta como aquela dada por \mathcal{F} , através da descarga dos canais de drenagem no ponto $(x_L; y_L)$.

Neste cenário, as hipóteses foram de difusão moderada e predominância de ventos moderados, isto é, ventos com velocidade compreendida entre 5 km/h e 15 km/h. Os parâmetros utilizados para esta simulação (figs.11, 12 e 13), são os apresentados na tabela 3, com $\Delta x = 0,05$ km, $\Delta y_{ar} = 0,1875$ km, $\Delta y_{agua} = 0,025$ km e $\Delta t = 0,01$ horas.

Tabela 3. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 3

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,3	km ² /h	A_0	0,04	l/(km ² h)
α_1	0,1	km/h	α_a	0,15	km ² /h
σ_u	0,0001	h ⁻¹	σ_a	0,0001	h ⁻¹
V_1	2,0	km/h	W_1	0,01	km/h
V_2	1,0	km/h	W_2	0,0001	km/h
k_1	0,0001	km/h	k_3	0,002	km/h
β_{12}	0,2	km/h	β_{21}	0,1	km/h
g_0	0,5	l/(km.h)	κ	0,5	h ⁻¹

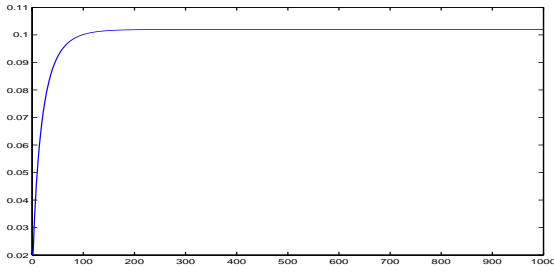


Figura 11. Concentração para um nó aéreo ao longo do tempo, no cenário 3

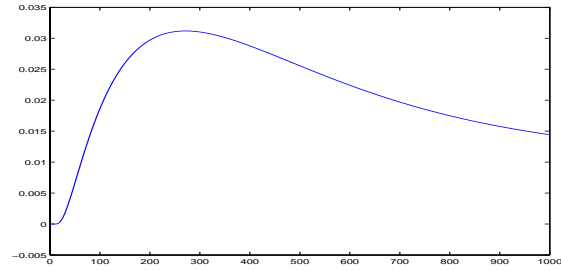


Figura 12. Concentração para um nó aquático ao longo do tempo, no cenário 3

O cenário 4, apresentado nas figuras 14, 15 e 16 a seguir, foi obtido com parâmetros apresentados na tabela 4, neste caso a hipótese foi que “o vento soprou mais forte”. Para este cenário os parâmetros de discretização, foram $\Delta x = 0,0667$ km, $\Delta y_{ar} = 0,2$ km, $\Delta y_{agua} = 0,02$ km e $\Delta t = 0,00625$ horas.

Tabela 4. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 4

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,3	km ² /h	A_0	0,04	l/(km ² h)
α_1	0,1	km/h	α_a	0,15	km ² /h
σ_u	0,0001	h ⁻¹	σ_a	0,0001	h ⁻¹
V_1	16,0	km/h	W_1	0,01	km/h
V_2	1,0	km/h	W_2	0,001	km/h
k_1	0,004	km/h	k_3	0,002	km/h
β_{12}	0,2	km/h	β_{21}	0,1	km/h
g_0	0,05	l/(km.h)	κ	0,02	h ⁻¹

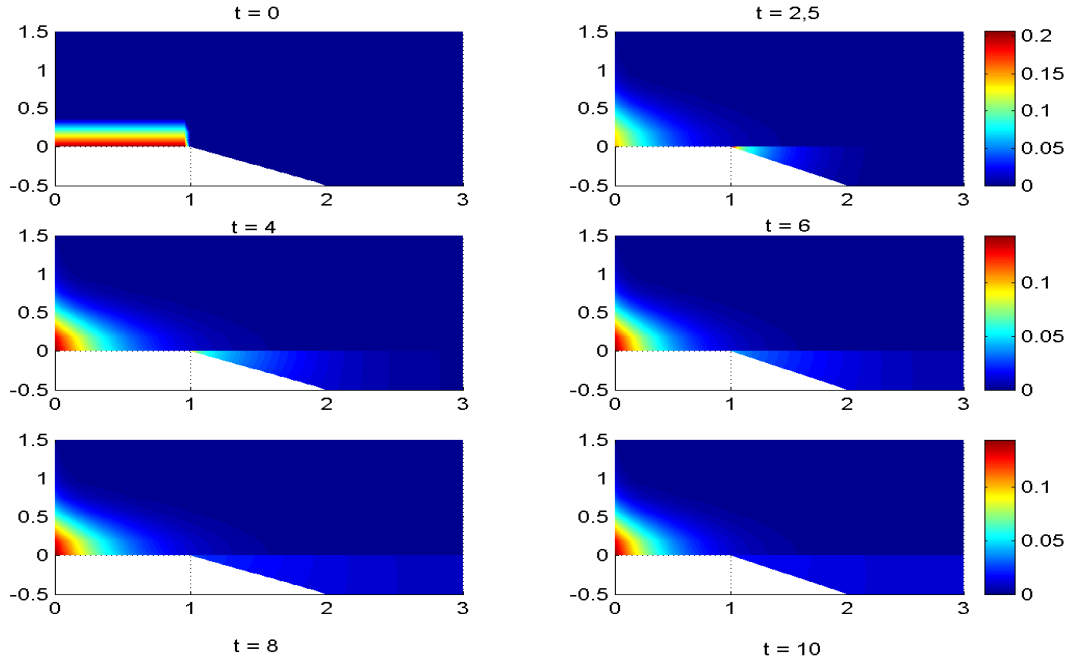


Figura 13. Simulação do cenário 3 - vento fraco e difusão alta - N^2 de Peclet = 0,625

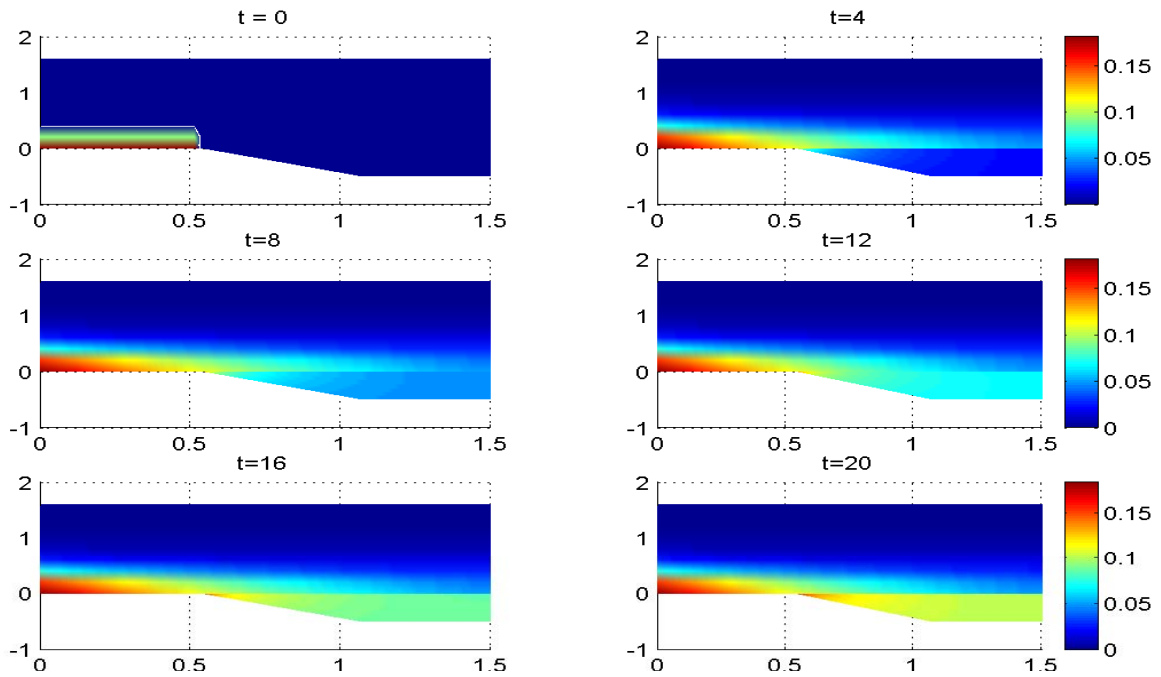


Figura 14. Simulação do cenário 4 - vento forte e difusão alta - N^2 de Peclet = 1,143

7 Conclusões

Nas simulações apresentadas na seção 6, os resultados obtidos mostraram-se de acordo com as expectativas para os fenômenos considerados. Naqueles cenários, o com-

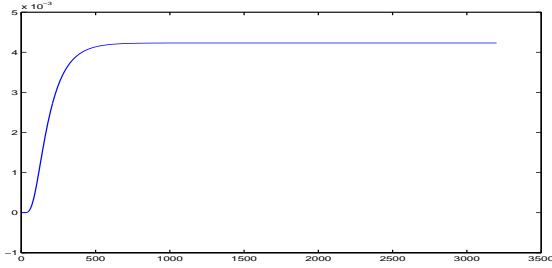


Figura 15. Concentração para um nó aéreo ao longo do tempo - cenário 4

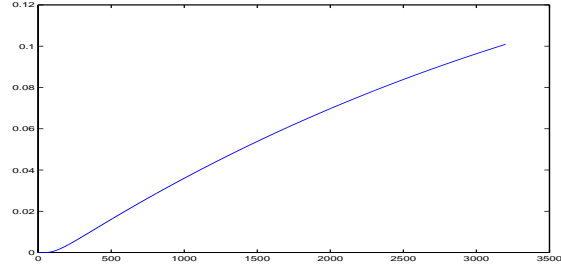


Figura 16. Concentração para um nó aquático ao longo do tempo - cenário 4

portamento do processo de dispersão apresentado nos gráficos foi compatível com o que ocorre em situações reais.

Apesar das limitações impostas pelas condições numéricas, foi possível fazer simulações com condições de vento bem adversas, que impuseram um número de Peclet bem próximo de seu limite. Mesmo assim, as oscilações numéricas inerentes a este tipo de aproximação ocorreram apenas nas primeiras iterações, em função daquilo que se espera no método de Crank-Nicolson. De modo que o comportamento do processo de dispersão do poluente pode ser avaliado, qualitativamente ao longo do tempo, em termos de seu efeito sobre o domínio.

Outra vantagem na escolha dos métodos de aproximação (Petrov/Galerkin – para a discretização espacial – e Crank-Nicolson – para a discretização temporal) pode ser percebida no tratamento de descontinuidades. Como nos últimos cenários (figuras 13 e 14), em que a fonte de poluentes foi colocada no ponto de intersecção de Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 , denominado P. Os resultados das aproximações mostraram-se coerentes com situações em que ocorre o efeito *runoff*, onde se observa um salto na concentração do poluente na vizinhança da interface ar-água-solo/sedimento.

No caso das limitações impostas pela condição de Peclet, estas podem ser contornadas usando técnicas como SUPG (Streamline Upwind Petrov/Galerkin), que dão um tratamento adequado para as oscilações indesejáveis (Brooks e Hughes, 1982; Heinrich et al., 1977), nas situações de advecção dominante, sobretudo como nos casos de vento forte. É o que pretendemos fazer num futuro próximo, como primeiro aperfeiçoamento do presente trabalho.

Os modelos e os códigos numéricos poderão integrar futuros estudos sobre o manejo sustentável de regiões de proteção próximas de áreas de intenso cultivo agro-industrial, incluindo recomendações para estabelecer políticas de preservação ambiental

ou manejo sustentável. Outra possível utilidade surge de modo natural na definição de estratégias de contingenciamento.

Apesar das limitações naturais do modelo e estruturais do algoritmo, os resultados evidenciam sua utilidade na simulação de cenários de risco. Neste sentido, novos desafios apontam no sentido de uma melhoria do algoritmo de forma a tratar o problema para situações mais irregulares, o que já vem acontecendo dentro de nosso grupo de pesquisa em Ecologia Matemática.

Em relação às possibilidades para trabalhos futuros, podem ser explorados os seguintes pontos:

- Demonstração de resultados de regularidade, convergência e estabilidade para o sistema acoplado e suas aproximações;
- Uso de elementos finitos de ordem superior (cf. Sossae et al. (1999); Sossae (1995));
- Análise e simulação para um domínios tridimensionais;
- Inclusão de SUPG (cf. Cantão (1998); De Oliveira (2003));
- Inclusão de características *fuzzy*.

O uso da “modelagem fuzzy”, na linha do que já vimos desenvolvendo com o chamado processo “fuzzyness” para a condição inicial (Diniz et al., 2001a,b), pode ser mais apropriado nos casos em que há incerteza ou imprecisão na condição inicial.

Para o tratamento dos parâmetros nos modelos, pode ser adequado o uso de *fuzzy*, como em Barros et al. (2000); Hüllermeier (1993), uma vez que a presença de vento traz, naturalmente, alguma incerteza para o termo advectivo. Assim, podemos vislumbrar uma série de trabalhos futuros que visam melhorar o modelo aqui proposto.

Isto posto, fica evidente que este trabalho não se encerra por aqui. Buscando melhorar tanto os modelos quanto os algoritmos, faz-se necessária a elaboração de projetos em conjunto com pesquisadores de outras áreas, como por exemplo, as de Engenharia Química e Engenharia Ambiental – em cooperação com outras instituições como EMBRAPA e CETESB – garantido assim um envolvimento interdisciplinar e interinstitucional para o aprimoramento do presente trabalho.

Referências

- Barros, L. C., Bassanezi, R. C., e Tonelli, P. A. (2000). Fuzzy modelling in population dynamics. *Ecological Modelling*, 128:27–33.
- Bassanezi, R. C. (2002). *Ensino–aprendizagem com modelagem matemática*. Ed. Contexto, S. Paulo.
- Brooks, A. N. e 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.
- Cantão, R. F. (1998). Modelagem e simulação numérica de derrames de óleo no canal de São Sebastião, SP. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Canziani, G., Rossi, C., Loïselle, S., *et al.* (1998). Projeto “manejo de recursos naturais em regiões de pantanal no mercosul”. Univ. Tandil (UNPCBA–Argentina), Univ. Sienna (Itália).
- Christie, I., Griffiths, D., Mitchell, A. R., e Zienkiewicz, O. C. (1976). Finite elements methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10:1389–1396.
- Connel, D. W. e Miller, G. J. (1984). *Chemistry and Ecotoxicology of Pollution*. John Wiley & Sons, N. York.
- De Oliveira, R. F. (2003). *O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: modelagem, análise numérica e simulações*. Tese de Doutorado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.
- Diniz, G. L. (2003). *Dispersão de poluentes num sistema ar–água: modelagem, aproximação e aplicações*. Tese de Doutorado, FEEC – Unicamp, Campinas/SP.
- Diniz, G. L., Fernandes, J. F. R., Meyer, J. F. C. A., e Barros, L. C. (2001a). A fuzzy Cauchy problem modelling the decay of the biochemical oxygen demand in water. Proceedings of 9th IFSA World Congress and 20th NAFIPS International Conference, Vancouver/BC, Canada, Jul 25–28.
- Diniz, G. L., Meyer, J. F. C. A., e Barros, L. C. (2001b). Solução numérica para um problema de Cauchy *fuzzy* que modela o decaimento radioativo. *TEMA – Tendências em Matemática Aplicada, Seleta do XXIII CNMAC/2000, Santos/SP.*, 2.1:63–72.
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology*. Random-House, N. York.
- Figueiredo, D. G. (1979). *Equações diferenciais aplicadas*. IMPA, R. Janeiro.
- Heinrich, J. C., Huyakorn, P. S., Mitchell, A. R., e Zienkiewicz, O. C. (1977). An upwind finite elements scheme for two-dimensional convective transport equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 11:131–143.

- Hüllermeier, E. (1993). An approach to modelling and simulation of uncertain dynamical systems. submitted to *Int. J. of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-based Systems*.
- Lions, J. L. (1961). *Equations Differentielles Operationelles*. Springer.
- Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16 of *Studies in Mathematical and its Applications*. North-Holland, Amsterdam.
- Mistro, D. C. (1992). O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Moreira, J. C. e Wrobel, L. C. (1983). Um modelo de elementos finitos para análise de dispersão. relatório interno COPPE-UFRJ.
- Odum, E. P. (1988). *Ecologia - trad. Christopher J. Tribe*. Ed. Guanabara, R. Janeiro.
- Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, Berlin.
- Pregnoatto, S. A. (2002). *Mal-das-cadeiras em Capivaras: Estudo, Modelagem e Simulação de um caso*. Tese de Doutorado, FEEC-Unicamp, Campinas/SP.
- Soderquist, C. J., Bowers, J. B., e Crosby, D. G. (1977). Dissipation of molinate in a rice field. *J. Agric. Food Chem.*, 25:940–945.
- Sossae, R. C. (1995). Dinâmica populacional densidade-dependente em processos de dispersão e migração. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Sossae, R. C., Meyer, J. F. C. A., Loiselle, S., e Rossi, C. (1999). Mathematical modeling and numerical simulation of space-dependent multispecies interactions. *Annals of the N. York Academy of Sciences*, 879:440–443.