

Relatório de Pesquisa – DMA/IMECC – 2005

Dispersão de poluentes em sistemas estuarinos: Modelo matemático, aproximação numérica e simulações

João Frederico C. A. Meyer ^a

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

Geraldo L. Diniz ^b

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

Resumo

Neste relatório fazemos a descrição do problema, a justificativa do modelo escolhido e apresentamos as características matemáticas do modelo para o problema de dispersão de poluentes nas áreas de estuário. A seguir, obtemos a formulação variacional com o intuito de discretizar o modelo, espacialmente - via método dos elementos finitos - e temporalmente - via método de Crank-Nicolson. Apresentamos também algumas simulações com cenários para situações de vento fraco e vento moderado.

Palavras-chave: Ecossistemas costeiros, Poluição de ecossistemas, Equação de reação-difusão, Problema de valor de contorno, Método dos elementos finitos

1 Introdução

Historicamente, as regiões costeiras vem apresentando uma intensa ocupação humana. Isto fez com que fosse gerado um forte impacto sobre os frágeis (cf. Tratado de

E-mails: joni@ime.unicamp.br (João Frederico C. A. Meyer), geraldo@ufmt.br (Geraldo L. Diniz).

Ramsar^{*}) ecossistemas presentes nestas regiões. No Brasil, isto não ocorreu de forma diferente, já que teve sua colonização a partir da costa. Atualmente, 56% de suas regiões metropolitanas encontram-se em estuários (Cetesb, 2001), nos quais estão localizados os principais pólos petroquímicos e sistemas portuários do país, os maiores responsáveis pela degradação destes ecossistemas (Diegues, 1987).

O estudo de sistemas estuarinos vem ganhando cada vez mais importância, devido às peculiaridades que envolvem estes sistemas, fazendo uma transição de sistemas de água doce para sistemas marinhos. Nos estuários acontecem importantes fases do ciclo de vida de muitos organismos.

A contaminação local, provocada pelos emissores industriais em cidades ou regiões próximas de estuários, tem superado o valor máximo permitido pelos organismos ambientais de controle e vigilância. Em alguns casos, mais graves, têm sido ultrapassados estes limites máximos permitidos pela legislação vigente (Cetesb, 2001). Isto reforçou a urgente necessidade de estudos e monitoramento de cenários ambientais, abrindo um promissor campo de trabalho para os pesquisadores.

Nas duas últimas décadas, em razão do crescente desenvolvimento industrial, houve uma deterioração de muitos desses sistemas, nas mais diversas regiões do planeta. Neste sentido, o presente trabalho trata do problema da dispersão de poluentes, através da modelagem matemática, que tem se mostrado muito eficiente para o estudo de perturbações globais ou mesmo de ecossistemas em particular.

Buscando estabelecer cenários possíveis, em função das políticas adotadas por autoridades regionais, no âmbito das regiões de estuário, é que se localiza o presente estudo. Serão apresentados o problema real e sua modelagem matemática, de modo a tratar o problema para um sistema ar-água. Em seguida, serão apresentadas as discretizações espacial e temporal do modelo de dispersão de poluentes, bem como alguns resultados de simulações obtidos para a região estuarina, para testar o modelo e o código numérico implementado.

^{*} O tratado de terras inundadas, assinado em Ramsar, Irã, em 1971, é um tratado inter-governamental 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/>.

2 Descrição do problema

A seguir, será feita a descrição da área de estudo, com uma breve apresentação das características da região e de sua biodiversidade. Esta descrição se apoia no texto descritivo do relatório técnico Cetesb (2001). Por fim, são apresentados os modelos matemáticos que descrevem o problema em estudo, na sua formulação clássica.

2.1 Área de estudo

Os sistemas estuarinos de Santos e São Vicente se inserem na região metropolitana da Baixada Santista, Estado de São Paulo (ver figura 3), e, conforme está expresso no relatório Cetesb (2001), “representam os mais importantes exemplos brasileiros de degradação ambiental por poluição hídrica e atmosférica de origem industrial em ambientes costeiros”.

Este processo de degradação teve um grande impulso, a partir de 1950, devido à sua proximidade da região metropolitana de São Paulo, à sua disponibilidade, naquela época, de água e energia elétrica e a construção de uma desenvolvida infraestrutura de transporte rodoviário, ferroviário e portuário (Cetesb, 2001). Isto favoreceu a implantação de diversas indústrias de base, principalmente siderurgia, petroquímica e de fertilizantes, em meio a uma ampla rede de canais estuarinos e manguezais, que se encontram confinados entre o oceano e as escarpas da Serra do Mar (ver fig.1).

Os poluentes industriais, somados aos resíduos e esgotos do Porto de Santos e cidades da região, provocaram um grave quadro de degradação ambiental, com um reflexo significativo na área social e de saúde pública (Cetesb, 2001). Estudos realizados desde 1974 (Cetesb, 1989; Johnscher-Fornasaro e Zagato, 1985; Cetesb, 1981, 1979; Tommasi, 1979), constataram o comprometimento do ambiente aquático em todos os locais estudados, cujas causas de degradação destes sistemas apontadas naqueles estudos, foi a poluição de origem doméstica e industrial, responsáveis pela contaminação química e microbiológica, e as alterações físicas dos habitats resultantes dos processos de erosão, assoreamento, aterros de canais e manguezais, bem como intervenções no sistema de drenagem (Cetesb, 2001).

Somente a partir de 1984, é que o processo de degradação desses ecossistemas costeiros e os efeitos danosos da poluição começou a ser revertido, quando iniciou um programa de controle da poluição do ar, água e do solo, no polo industrial de Cubatão,



Figura 1. Cachoeira em S.Vicente/SP

envolvendo investimentos da ordem de US\$ 800 milhões (Cetesb, 2001).

Dentre as diversas ações realizadas em atendimento ao “Programa de Recuperação da Qualidade Ambiental de Cubatão”, efetivadas pela CETESB, pode ser destacada a implantação de sistemas de tratamento de efluentes industriais em todas as fábricas da região, resultando na acentuada redução da carga de poluentes para o sistema hídrico (Cetesb, 2001). Entretanto, apesar deste virtuoso esforço para controle da poluição e melhoria da qualidade ambiental, levantamentos posteriores (Eysink *et al.*, 1991; Vargas-Boldrini *et al.*, 1991; Cetesb, 1990), concluíram que a região permanecia impactada por concentrações elevadas de metais pesados e compostos organoclorados na água, nos sedimentos e nos organismos aquáticos (ver fig.2).

Estes trabalhos foram os últimos levantamentos sistemáticos sobre a contaminação ambiental na região da Baixada Santista e indicavam, ainda, os riscos de bioacumulação dos poluentes nos organismos que estariam retornando ao ambiente em recuperação. Com isso, a população ribeirinha estaria sujeita ao consumo de pescados sob efeito da contaminação (Cetesb, 2001).



Figura 2. Amanhecer na Praia de Maramduba – S.Vicente/SP

2.2 Caracterização da área de estudo

Os manguezais da região, que representam cerca de 43% dos 231 km² de manguezais da costa paulista (Herz, 1987), foram significativamente alterados. Um levantamento do estado de conservação dos manguezais da região, baseado em fotografias aéreas feitas no período entre 1958 e 1989, mostrou que 44% (cerca de 58 Km²) dos manguezais existentes, originalmente, na Baixada Santista estavam degradados, 16% (20 km²) haviam sido aterrados para ocupação urbana ou industrial e que apenas 40% se mantinham em bom estado de conservação (Cetesb, 2001).

A região abriga também bosques de mangue, rios e estuários que são muito usados para a pesca profissional e recreativa, ver fig.3.

2.3 Modelo matemático

Na descrição dos modelos que serão apresentados, nesta primeira abordagem com algumas simplificações do domínio (ver fig. 5), vamos considerar contaminantes que penetram na água, seja devido à densidade ou à solubilidade.

A escolha do domínio se caracteriza por uma suposição inicial de direção predominante de vento, para a simulação dos cenários, como está apresentado na figura 4.

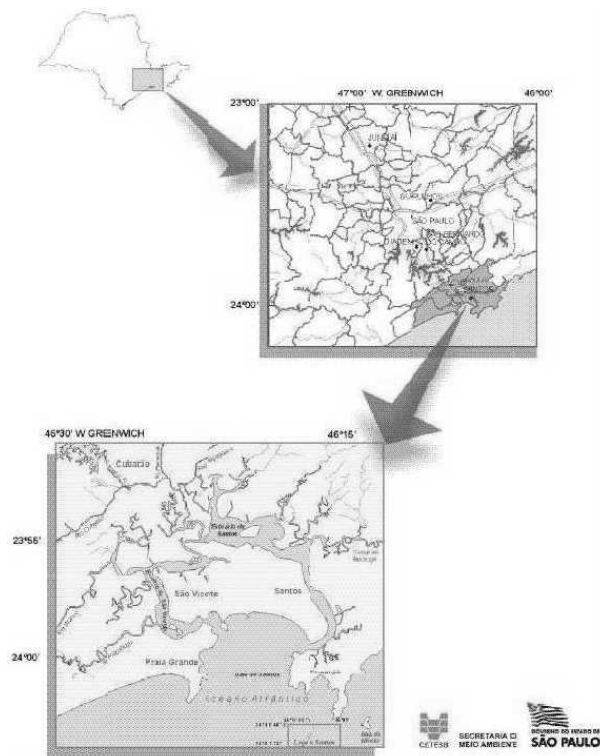


Figura 3. Localização da área de estudo, obtida do relatório técnico Cetesb (2001)

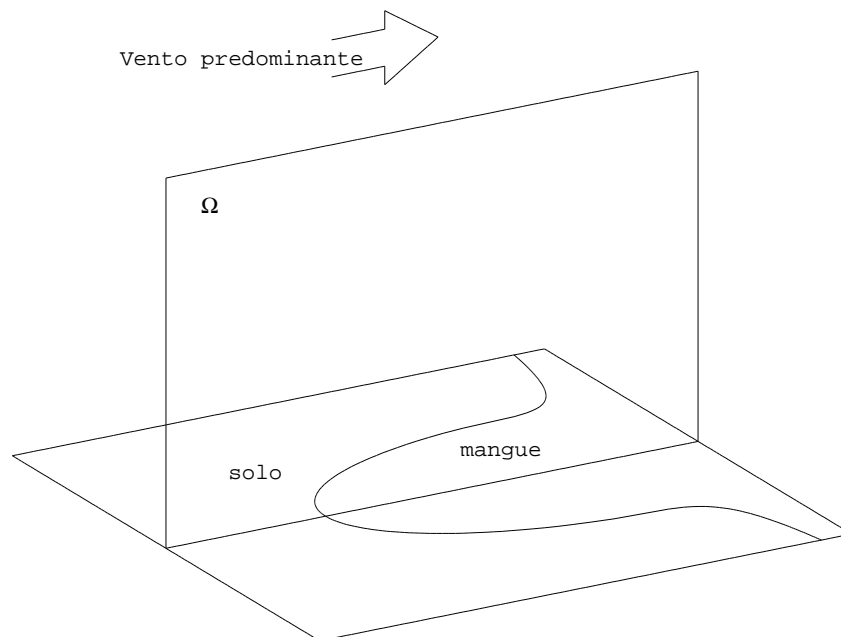


Figura 4. Domínio para estudo,

No modelo devem ser considerados os fenômenos de difusão (ou dispersão, cf. Okubo (1980)), o transporte advectivo, os diversos fenômenos de decaimento aproximados em

conjunto, as possíveis fontes de contaminação e a penetração no meio aquático.

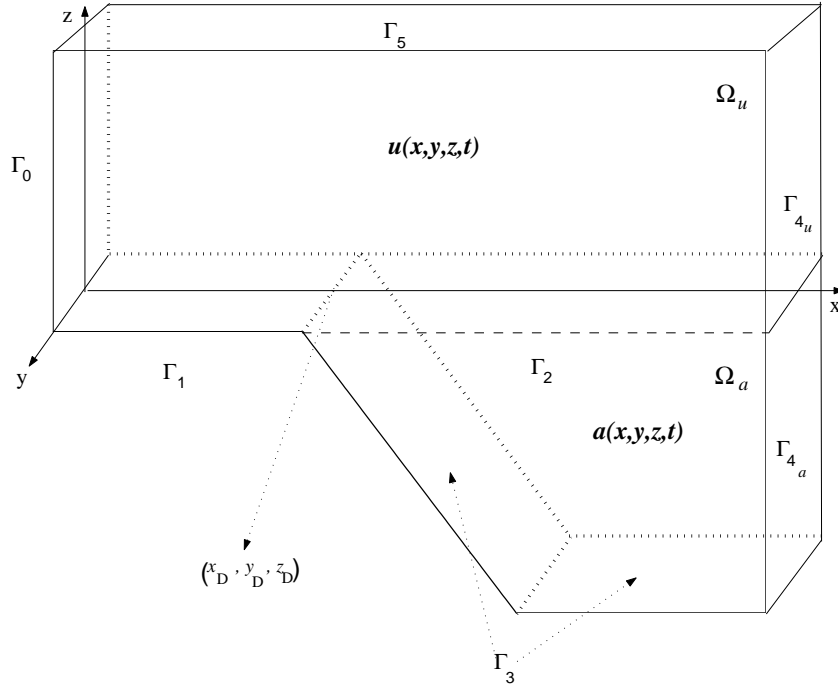


Figura 5. Detalhes do domínio Ω

Assim, chamando de $u(x, y, z, t)$ e $a(x, y, z, t)$ a concentração do poluente nos meios aéreo e aquático, respectivamente, no ponto (x, y, z) e instante t , o modelo é descrito no meio aéreo, de forma genérica, por:

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

enquanto, no meio aquático, a taxa de variação da concentração do poluente $a(x, y, z, t)$ pode ser, genericamente, designada por:

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

Os três primeiros termos das equações acima, em termos de modelagem clássica

vice-versa, não figura no sistema (2.1) acima, já que ocorre na fronteira entre os dois meios, aparecendo como condição de contorno, cujas expressões são:

$$\begin{aligned} -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = 0; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = K_1 u; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{12}(u - a) \Big|_{\Gamma_2}; \quad -\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4u}} = 0; \\ -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} = K_3 a; \quad -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4a}} = 0; \quad -\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{21}(a - u) \Big|_{\Gamma_2} \quad \text{e} \quad u \Big|_{\Gamma_5} = 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

E, finalmente, o termo \mathcal{F}_a , na eq.(2.1) irá descrever a fonte existente precisamente na intersecção dos meios aéreo com o aquático e em contato com o solo: o *runoff* no ponto $P = (x_D, y_D, z_D)$. Esta fonte será modelada por:

$$\mathcal{F}_a = \begin{cases} A_0 e^{-\kappa t} & \text{se } (x, y, z) = (x_D, y_D, z_D) \\ 0 & \text{se } (x, y, z) \neq (x_D, y_D, z_D) \quad \forall t \in [0, T], \end{cases} \quad (2.3)$$

Esta escolha de \mathcal{F}_a se deu, considerando que haja um acúmulo do poluente no solo (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_D, y_D, z_D) do domínio – tal como o efeito *runoff*.

Estas equações é que constituem a chamada formulação clássica ou “forte” do problema. Tendo em vista a necessidade de demonstrar e obter, de algum modo, a existência e unicidade de solução do problema. 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 para cada instante $t \in [0, T]$, faz-se necessária a obtenção da formulação variacional ou “fraca” do problema, feita a seguir.

3 Formulação variacional do problema

Na abordagem do problema, devemos obter a “formulação variacional” do sistema 2.1 apresentado, anteriormente. A formulação variacional do modelo consiste em obter uma outra formulação das equações (2.1–2.2), cujas soluções, denominadas soluções fracas, devem ser procuradas num espaço métrico conveniente. A justificativa de tal procedimento está na possibilidade de se usar funções que comportem modelos de descontinuidade, como no caso da função que modela o termo fonte, para o tipo de fontes pontuais no domínio.

Neste caso, iremos procurar soluções $u(\mathcal{X}, t)$ e $a(\mathcal{X}, t)$, em espaços \mathcal{V}_α , convenientes, dados por:

$$\mathcal{V}_u = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2((0, T], U) : \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega_u) \right\}, \text{ com } U = \left\{ u \in H^1(\Omega_u) : u \Big|_{\Gamma_5} = 0 \right\} \text{ e}$$

$$\mathcal{V}_a = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2((0, T], A) : \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega_a) \right\}, \text{ com } A = \{a \in H^1(\Omega_a)\}.$$

Para obtermos a formulação fraca do problema, vamos supor uma variação linear crescente no coeficiente de difusão, ou seja:

$$\alpha_u(z) = \alpha_0 + \alpha_1 z \quad \text{onde } \alpha_1, \alpha_0 \text{ e } \alpha_a > 0 ; z \in [0, H],$$

\vec{V} será considerado periódico, com ciclo diário, dado por:

$$\vec{V} = \langle V_1 \text{sen}(\omega_1 t) ; -V_2 \rangle$$

onde $V_1 \text{sen}(\omega_1 t)$ representa uma primeira aproximação do campo de velocidade para a componente horizontal do vento predominante. E, nesta primeira abordagem, V_2 constante para a componente vertical da velocidade resultante da ação gravitacional (*cf.* Figueiredo, 1979).

Para a componente advectiva (na água), iremos incluir o efeito da maré, assumindo que:

$$\vec{W} = \langle W_1 \text{sen}(\omega_2 t) ; -W_2 \rangle,$$

W_1 e W_2 constantes positivas, nesta primeira abordagem do problema.

Após a multiplicação pela função teste e integrando no sentido de Lebesgue, a formulação fraca para o sistema (2.1–2.2), é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l}
\iint_{\Omega_u} \left\{ \left[\frac{\partial u}{\partial t} + V_1 \text{sen} \left(\frac{t}{12\pi} \right) \frac{\partial u}{\partial x} - V_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right] \nu + (\alpha_0 + \alpha_1 y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] \right\} d\mu \\
+ \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu + K_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \\
= \iint_{\Omega_u} \mathcal{F}_u \nu d\mu + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_u \\
\\
\iint_{\Omega_a} \left\{ \left[\frac{\partial a}{\partial t} + W_1 \text{sen} \left(\frac{t}{12\pi} \right) \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu + \alpha_a [\nabla a \cdot \nabla \nu] \right\} d\mu \\
+ \sigma_a \iint_{\Omega_a} a \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + K_3 \int_{\Gamma_3} a \nu d\gamma \\
= \iint_{\Omega_a} \mathcal{F}_a \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_a, \forall t \in (0, T]
\end{array} \right. \quad (3.4)$$

4 Discretização do modelo

A discretização do modelo, na formulação fraca (3.4), foi feita através do Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal).

O Método dos Elementos Finitos (via Petrov/Galerkin) é uma técnica geral para construção de aproximações da solução de um problema de valor de contorno, que envolve a divisão do domínio da solução num número finito de subdomínios simples (os Elementos Finitos) e usando conceitos variacionais, construímos uma aproximante da solução sobre a coleção de Elementos Finitos (ver Becker *et al.* (1981) ou Carey e Oden (1981)).

Denominando de \mathcal{V}_{h_u} e \mathcal{V}_{h_a} os subespaços de \mathcal{V}_u e \mathcal{V}_a , respectivamente, gerado pelas N_{h_u} e N_{h_a} funções φ_i (chamadas de funções teste).

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

$$\nu_{h_u} = \sum_{i=1}^{N_{h_u}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y) \quad \nu_{h_a} = \sum_{i=1}^{N_{h_a}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y)$$

Com isso, é feita a discretização dos domínios aéreo e aquático (Ω_u e Ω_a , respectivamente), considerando os subespaços \mathcal{V}_{h_u} e \mathcal{V}_{h_a} de \mathcal{V}_u e \mathcal{V}_a , o que fornece para o sistema (3.4):

$$\begin{cases}
\sum_{j=1}^{N_{hu}} \left\{ \frac{du_j}{dt} \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + u_j(t) \left[\left(\alpha_u \nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} - \left(\vec{V} \cdot \nabla \varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} \right. \right. \\
\left. \left. + \sigma_u \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} \right] \right\} + K_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j(t) \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_1} + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j(t) \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \\
= \left(\mathcal{F}_u \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + \beta_{12} \sum_{k \in \Gamma_2} a_k(t) \left\langle \varphi_k \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2}, \quad \forall \varphi_i \in \text{base}(\mathcal{V}_{hu}) \\
\sum_{k=1}^{N_{ha}} \left\{ \frac{da_k}{dt} \left(\varphi_k \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} + a_k(t) \left[\left(\alpha_a \nabla \varphi_k \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} - \left(\vec{W} \cdot \nabla \varphi_k \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\
\left. \left. + \sigma_a \left(\varphi_k \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \right] \right\} + K_3 \sum_{k \in \Gamma_3} a_k(t) \left\langle \varphi_k \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} + \beta_{21} \sum_{k \in \Gamma_2} a_k(t) \left\langle \varphi_k \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \\
= \left(\mathcal{F}_a \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j(t) \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2}, \quad \forall \varphi_i \in \text{base}(\mathcal{V}_{ha})
\end{cases} \quad (4.5)$$

Para a discretização da variável temporal (no caso, via Crank-Nicolson), optamos por um método implícito com diferenças centradas (Carnahan *et al.*, 1969; Kardestuncer e Norrie, 1987), de modo a transformar o modelo, discretizado espacialmente, num sistema de equações algébricas implicitamente definido como em Diniz (2003) e Sossae (1995).

Na discretização temporal, com diferenças centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, fazendo as seguintes aproximações:

$$\frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \quad \text{onde} \quad u_j^{n+1} = u_j(t_{n+1}) \quad (4.6)$$

e

$$u_j \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \quad (4.7)$$

daí, levando (4.6) e (4.7) em (4.5), para a discretização temporal, multiplicando por Δt e reagrupando para os termos $(n+1)$ e (n) , com as notações dos produtos internos, obtivemos o sistema linear acoplado:

$$\left(\begin{array}{l}
\sum_{j=1}^{N_{h_u}} u_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_u \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} + \frac{\Delta t}{2} \left[\left([\alpha_0 + \alpha_1 y] \nabla \varphi_j \Big| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} \right. \right. \\
+ V_1 \operatorname{sen} \frac{t}{12\pi} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} - V_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} + K_1 \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_1} \\
+ \left. \left. \beta_{12} \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} - \frac{\beta_{12} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j^{(n+1)} \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} = \\
= \sum_{j=1}^{N_{h_u}} u_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_u \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} - \frac{\Delta t}{2} \left[\left([\alpha_0 + \alpha_1 y] \nabla \varphi_j \Big| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} \right. \right. \\
+ V_1 \operatorname{sen} \frac{t}{12\pi} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} - V_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} + K_1 \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_1} \\
+ \left. \left. \beta_{12} \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} + \frac{\beta_{12} \Delta t}{2} \sum_{k \in \Gamma_2} a_k^{(n)} \left\langle \varphi_j \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} + \Delta t \left(\mathcal{F}_u \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_u} \\
\forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_u} \\
\sum_{k=1}^{N_{h_a}} a_k^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_a \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_k \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_k \Big| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\
+ W_1 \operatorname{sen} \frac{t}{12\pi} \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial x} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + K_3 \left\langle \varphi_k \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} \\
+ \left. \left. \beta_{21} \left\langle \varphi_k \Big| \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 \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \\
= \sum_{k=1}^{N_{h_a}} a_k^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_a \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_k \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_k \Big| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\
+ W_1 \operatorname{sen} \frac{t}{12\pi} \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial x} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} + K_3 \left\langle \varphi_k \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} \\
+ \left. \left. \beta_{21} \left\langle \varphi_k \Big| \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 \Big| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} + \Delta t \left(\mathcal{F}_a \delta_L(\Omega_a) \Big| \varphi_i\right)_{0;\Omega_a} \\
\forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_a}
\end{array} \right) \quad (4.8)$$

Denominando \mathbb{U} o vetor coluna formado pelos vetores u_{h_a} e a_{h_a} , ou seja,

$$\mathbb{U} = \begin{bmatrix} u_{h_u} \\ a_{h_a} \end{bmatrix}$$

o sistema de equações lineares algébrico (4.8) pode ser escrito de maneira mais compacta

na forma matricial:

$$\mathcal{A} \cdot \mathbb{U}^{(n+1)} = \mathcal{B} \cdot \mathbb{U}^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}} \quad \text{dado} \quad \mathbb{U}^{(0)} = \begin{bmatrix} u^{(0)} \\ a^{(0)} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

5 Alguns resultados numéricos

Nas simulações apresentadas adiante, alguns dos parâmetros utilizados foram encontrados na literatura, entretanto, para o modelo proposto, muitos dos parâmetros tiveram de ser estimados, dentro de espectros presumidamente plausíveis, para a simulação dos cenários e teste dos códigos numéricos desenvolvidos.

Nestas simulações, a principal característica que merece ser ressaltada é sua visualização através de gráficos, cuja compreensão pode ser melhor assimilada. Uma vez que o problema de dispersão de poluentes tem despertado o interesse de pesquisadores das mais variadas áreas.

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.

Para a simulação dos cenários a seguir, fizemos uma estimativa de condição inicial, de maneira empírica. Além disso, supomos que a fonte no domínio é aquela dada por \mathcal{F}_a , através da descarga dos canais de drenagem no ponto $(x_D; y_D; z_D)$.

Na simulação do cenário 1, as hipóteses foram de difusão moderada e predominância de ventos fracos, isto é, ventos com velocidade inferior a 5 km/h. Os parâmetros utilizados para esta simulação (fig.6), são os apresentados na tabela 1.

Na simulação do cenário 2, as hipóteses foram de difusão moderada e predominância de ventos moderados, isto é, ventos com velocidade entre 5 e 15 km/h. Os parâmetros utilizados para esta simulação (fig.9), são os apresentados na tabela 2.

Tabela 1. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 1

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

Parâmetros da discretização		
Parâmetros	Valores	Unidades
Δx	0,05	km
Δy	0,0196	km
Δt	0,048	horas

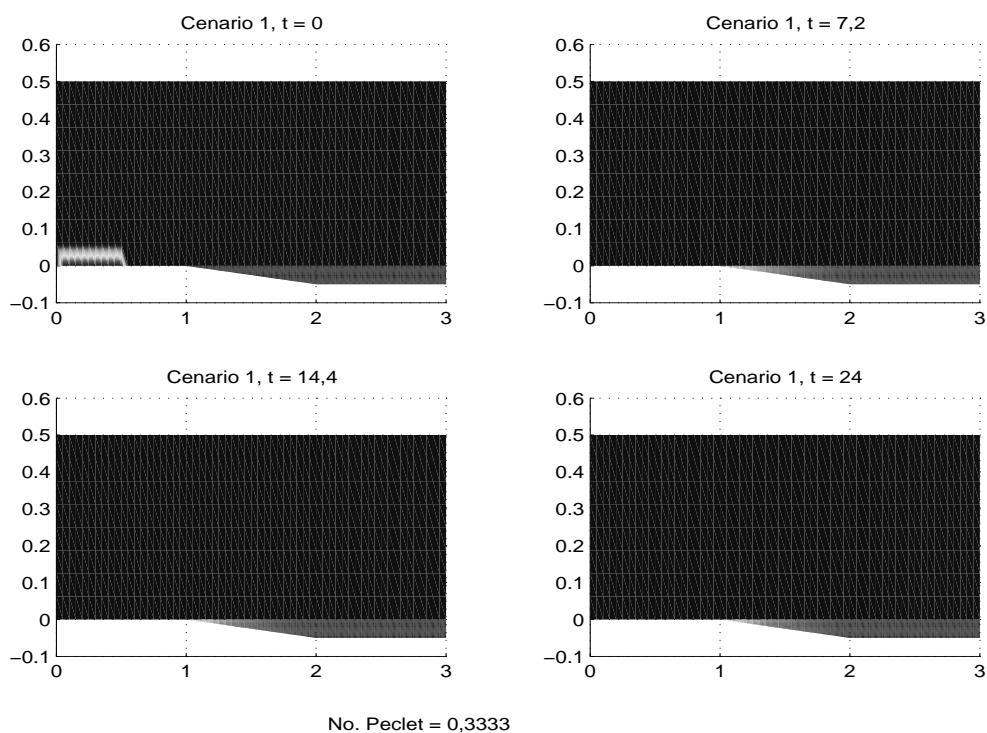


Figura 6. Simulação do Cenário 1

6 Conclusões

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

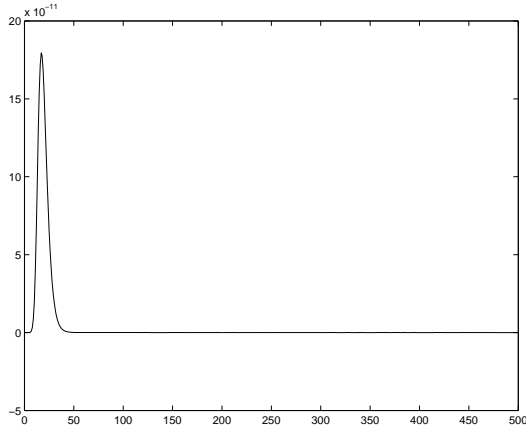


Figura 7. Concentração para um nó aéreo

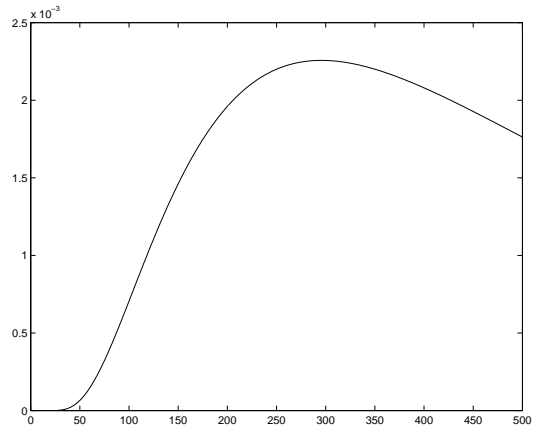


Figura 8. Concentração para um nó aquático

Tabela 2. Parâmetros utilizados na simulação do cenário 2

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,3	km ² /h	α_a	0,1	km ² /h
α_1	0,1	km/h	σ_a	0,0001	h ⁻¹
σ_u	0,0001	h ⁻¹	W_1	0,01	km/h
V_1	9,0	km/h	W_2	0,01	km/h
V_2	1,0	km/h	k_3	0,002	km/h
k_1	0,0001	km/h	β_{21}	0,01	km/h
β_{12}	0,02	km/h	κ	0,05	h ⁻¹
A_0	0,04	1/(km.h)			

Parâmetros da discretização		
Parâmetros	Valores	Unidades
Δx	0,025	km
Δy	0,015 e 0,002	km
Δt	0,0024	horas

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

Apesar das limitações impostas pela condição de Peclet, 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 neste tipo de aproximação ocorreram apenas nas primeiras iterações. 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.

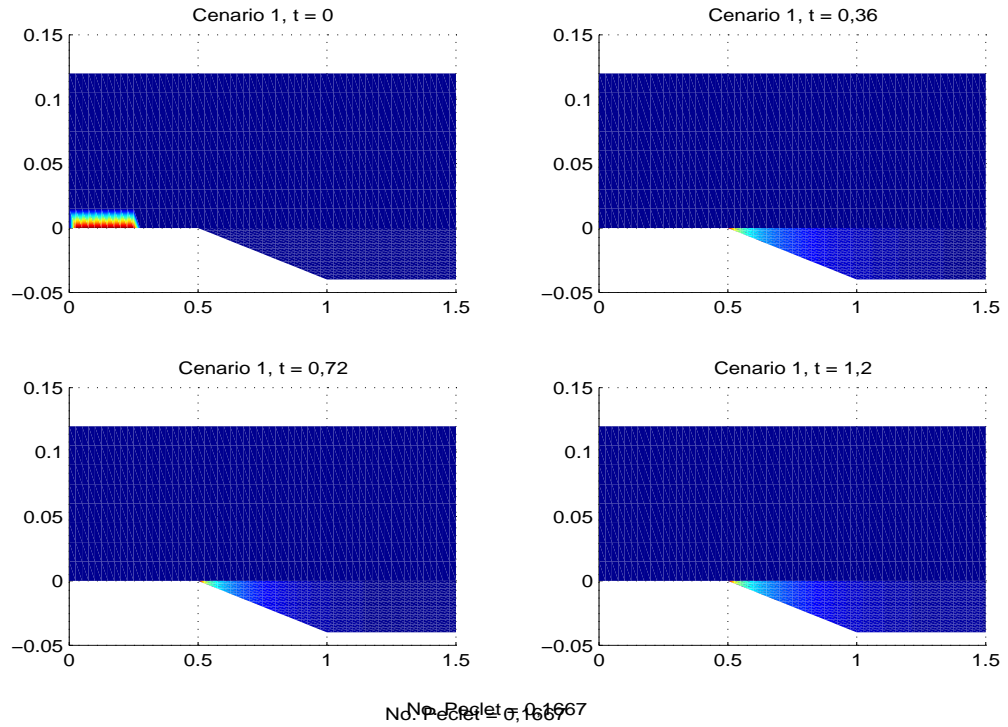


Figura 9. Simulação do Cenário 2

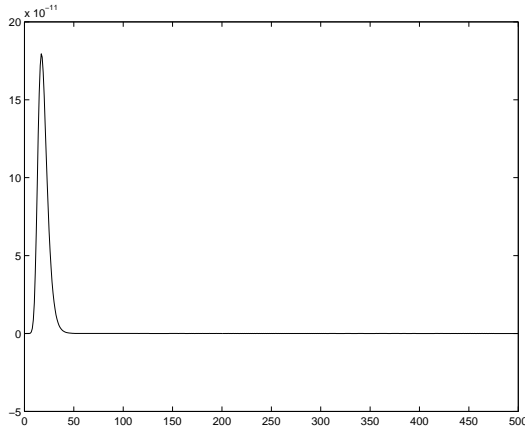


Figura 10. Concentração para um nó aéreo

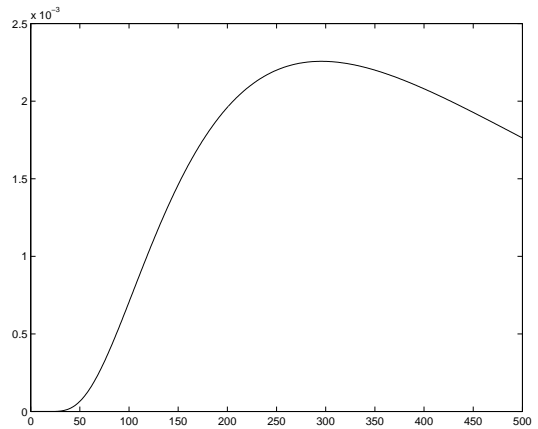


Figura 11. Concentração para um nó aquático

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, como nos casos de vento moderado ou de vento forte (velocidade acima de 15 km/h).

Os modelos e os códigos numéricos poderão integrar futuros estudos sobre o manejo

sustentável de regiões costeiras próximas de áreas de intensa atividade agro-industrial, incluindo recomendações e/ou políticas de proteção ambiental.

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

- Uso de elementos finitos de ordem superior;
- Análise e simulação para um domínio tridimensional;
- Inclusão de SUPG (cf. Cantão (1998); Oliveira (2003));
- Inclusão de características *fuzzy* (Diniz *et al.*, 2001a,b).

Buscando melhorar tanto o modelo quanto o algoritmo, 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 CETESB – garantido assim um envolvimento interdisciplinar e interinstitucional para o aprimoramento do presente trabalho.

Referências

- Bassanezi, R. C. (2002). *Ensino-aprendizagem com modelagem matemática*. Ed. Contexto, S. Paulo.
- Bassanezi, R. C. e Ferreira Jr., W. C. (1988). *Equações Diferenciais com Aplicações*. Ed. Harbra, S. Paulo.
- Becker, E. B., Carey, G. F., e Oden, J. T. (1981). *Finite Elements: an introduction*, volume 1. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- 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.
- Carey, G. F. e Oden, J. T. (1981). *Finite Elements: mathematical aspects*, volume 4. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Carnahan, B., Luther, H. A., e Wilkes, J. O. (1969). *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, N. York.
- CETESB, (2001). *Contaminação do Sistema Estuário Santos/São Vicente (SP) - Brazil*. Relatório Técnico CETESB. 183p.

- , (1990). *Contaminantes na Bacia de Cubatão e seus reflexos na bióta aquática*. Relatório Técnico CETESB. 81p. mais anexos e mapas.
- , (1989). *Avaliação preliminar da contaminação por metais pesado na água, sedimento e organsimos aquáticos do Rio Cubatão (SP)*. Relatório Técnico CETESB. 28p. mais anexos.
- , (1981). *Metais pesados na Baía de Santos e Estuários de Santos e São Vicente*. Relatório Técnico CETESB. 231p.
- , (1979). *Poluição das águas no Estuário e Baía de Santos*. Relatório Técnico CETESB. Volume I. 71p.
- Diegues, A. C. (1987). Conservação e desenvolvimento sustentado de ecossistemas litorâneos no Brasil. In: *Simpósio sobre Ecossistemas da Costa Sul e Sudeste Brasileira*. Cananéia (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.
- Eysink, G. G. J., Lamparelli, M. C., Vargas-Boldrini, C. e Martins, M. C. (1991). Contaminants in the Cubatão riverbasin and its estuary (SP. Brazil), relating to the aquatic biota. Part I. Heavy metals, arsenic and cyanide. In: *11th Biennial Int. Estuarine Research Conference*. – San Francisco (USA). Session Inputs and Cycling of Natural and Contaminant Materials in Estuaries.
- 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.
- Diegues, A. C. (1987). Estrutura física dos manguezais da Costa do Estado de São Paulo. In: *Simpósio sobre Ecossistemas da Costa Sul e Sudeste Brasileira*. Cananéia (SP).
- Johnscher-Fornasaro, G. e Zagato, P. A. (1985). Utilização da comunidade bentônica como indicador da qualidade de rios da região de Cubatão In: *Anais do 13º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental*. Nº 105. 8p.
- Kardestuncer, H. e Norrie, D. H. (1987). *Finite Element Handbook*. McGraw-Hill, N.

York.

- Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16 of *Studies in Mathematical and its Applications*. North-Holland, Amsterdam.
- Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, Berlin.
- 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.
- Sossae, R. C. (1995). Dinâmica populacional densidade-dependente em processos de dispersão e migração. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Tommasi, L. R. (1979). Considerações ecológicas sobre o sistema estuarino de Santos (SP). Tese de Livre-Docência. USP, Inst. Oceanográfico. 2V. 489p.
- Vargas-Boldrini, C., Eysink, G. G. J., Lamparelli, M. C. e Martins, M. C. (1991). Contaminants in the Cubatão riverbasin and its estuary (SP. Brazil), relating to the aquatic biota. Part II. Organic Compounds. In: *11th Biennial Int. Estuarine Research Conference*. – San Francisco (USA). Session Inputs and Cycling of Natural and Contaminant Materials in Estuaries.