

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA AMBIENTAL

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE
DIÓXIDO DE CARBONO NA REPRESA DA USINA
HIDRELÉTRICA DE MANSO E REGIÃO**

Beatris Carila da Silva

Cuiabá - MT

— Dezembro 2018 —

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA AMBIENTAL

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE
DIÓXIDO DE CARBONO NA REPRESA DA USINA
HIDRELÉTRICA DE MANSO E REGIÃO**

BEATRIS CARILA DA SILVA

Tese apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física Ambiental da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessário para obtenção do título de Doutora em Física Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Geraldo Lúcio Diniz

Cuiabá - MT

– Dezembro 2018 –

Dados Internacionais de Catalogação na Fonte.

S586m Silva, Beatris Carila da.
Modelagem e simulação da dispersão de dióxido de carbono na represa da usina hidrelétrica de Manso e sua região / Beatris Carila da Silva. -- 2018
xiii, 50 f. : il. color. ; 30 cm.

Orientador: Geraldo Lúcio Diniz.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Mato Grosso, Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física Ambiental, Cuiabá, 2018.
Inclui bibliografia.

1. Equação diferencial parcial. 2. Elementos finitos. 3. Simulação computacional. 4. Modelagem matemática.. I. Título.

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Permitida a reprodução parcial ou total, desde que citada a fonte.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física Ambiental

FOLHA DE APROVAÇÃO

TÍTULO: **MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO NA USINA HIDRELÉTRICA DE MANSO E REGIÃO**

AUTORA: **BEATRIS CARILA DA SILVA**

Tese de Doutorado defendida e aprovada em 19 de dezembro de 2018, pela comissão julgadora:

 Prof. Dr. Geraldo Lúcio Diniz Orientador Instituto de Ciências Exatas e da Terra - UFMT	 Prof. Dr. Moisés dos Santos Cecconello Examinador Interno Instituto de Ciências Exatas e da Terra - UFMT
 Prof. Dr. André Krindges Examinador Interno Instituto de Ciências Exatas e da Terra - UFMT	 Prof. Dr. Walfan de Souza Pereira Examinador Externo Instituto Federal de Mato Grosso – IFMT
 Prof. Dr. Edgar Nascimento Examinador Externo Instituto Federal de Mato Grosso – IFMT	

*O temor do Senhor é o princípio da ciência;
os loucos desprezam a sabedoria e a instrução.*

Provérbios 1:7, A Bíblia Sagrada

*A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu, mas pensar o que
ninguém ainda pensou sobre aquilo que todo mundo vê*

Arthur Schopenhauer

Agradecimento

Nesses tempos de doutorado são vários os que me acompanharam, sem eles seria impossível realizar este trabalho. Sendo assim, sou grata:

À Deus, por tudo recebido de suas mãos, pois sem Ele nada seria possível.

Ao professor e orientador Geraldo por toda atenção.

Ao professor André pelos ensinamentos, dedicação, incentivos e pela paciência de suportar minhas incansáveis dúvidas.

Aos meus colegas do doutorado pela colaboração e apoio.

Aos meus pais, Elezil e Benedito, e meu irmão Everson, pelo apoio e incentivo que sempre me deram em todos os momentos.

Ao meu esposo Maycon, agradeço pela compreensão, paciência, dedicação e companheirismo desempenhado.

Sumário

Agradecimento	vi
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
Lista de Símbolos	xi
Resumo	xii
Abstract	xiii
Introdução	1
Introdução	1
1 O dióxido de Carbono	5
1.1 Área de estudo: Lago do Manso e regiões afluentes	8
1.2 Área inundada	12
2 O Problema e a Formulação do Modelo	15
2.1 O Problema	15
2.2 Modelos Matemáticos	17
2.3 Formulação do Modelo	17
2.3.1 O fluxo J	19
2.3.1.1 Difusão	19
2.3.1.2 Advecção	19
2.3.1.3 Degradação	20
2.3.1.4 Fontes	20
2.4 Condições de Contornos	20
3 Formulação Variacional para a Equação Clássica e Discretização	22
3.1 Formulação Variacional	22
3.2 Existência e Unicidade da Solução Fraca	24

3.3	Estabilidade Numérica	25
3.4	Formulação Variacional do Problema - Manso	25
3.5	Discretização do Domínio	27
3.6	Elementos da Fronteira	28
3.7	Domínio tridimensional	28
3.8	Discretização Espacial	30
3.9	Discretização Temporal: Crank-Nicolson	32
4	Simulações, Resultados e Análises	35
4.1	Simulação de Cenários	38
4.1.1	Cenário 1	38
4.1.2	Cenário 2	42
4.2	Conclusão	45
	Referências Bibliográficas	46

Lista de Figuras

1.1	Ciclo do Carbono no ecossistema terrestre. Fonte: PINTO-JR, 2007.	7
1.2	Localização do reservatório de Manso e da Bacia do Rio Manso em Mato Grosso. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2018.	9
1.3	Usina Hidrelétrica de Manso. Fonte: Furnas, 2018.	11
1.4	Área inundada do Reservatório de Manso em set/1999. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013.	13
1.5	Evolução da área inundada do Reservatório de Manso no período de mai/2000 a dez/2000. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013.	14
3.1	Transformação do triângulo e no triângulo \hat{e} pela transformação afim \mathbf{T} . .	28
3.2	Transformação afim \mathbf{T}_e	30
4.1	Discretização espacial de Ω em tetraedros	37
4.2	Fronteiras Γ_1 e Γ_2	37
4.3	Fronteiras do Domínio Ω	38
4.4	Discretização do domínio	38
4.5	Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2	39
4.6	Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2	40
4.7	Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iteração 40 .	41
4.8	Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ nas iterações 40s 150 e 298	41
4.9	Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2	42
4.10	Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2	43
4.11	Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iteração 40 .	43
4.12	Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iterações 150 e 300.	44
4.13	Comportamento estacionário da concentração de CO_2 para os nós 1 e 1198	45

Lista de Tabelas

1.1	Gases que compõem a Baixa Troposfera	7
2.1	Histórico dos trabalhos realizados	17
4.1	Parâmetros utilizados no cenário 1.	39
4.2	Parâmetros utilizados no cenário 2.	42

Lista de Símbolos

α	Coeficiente de difusão
σ	Coeficiente de degradação
μ	Medida (no sentido de Lebesgue)
φ	Função base
Ω	Domínio fechado
Γ	Fronteira do domínio
η	Vetor normal exterior unitário
∇	Operador nabla
H^1	Espaço de Sobolev de ordem 1
L^2	Espaço de Banach (funções de quadrado integrável)
\vec{V}	Campo de velocidades de transporte

Resumo

SILVA, B.C. **Modelagem e simulação da dispersão de dióxido de carbono na represa da usina hidrelétrica de Manso e sua região.** Cuiabá, MT. 2018. 64f. Tese (doutorado) – Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso.

Neste trabalho é apresentado um estudo do problema de dispersão de dióxido de carbono no meio água-ar, em que o objetivo é propor um modelo matemático tridimensional (3D) inédito a simulação numérica com cenários sobre uma região circunvizinha à usina hidrelétrica do Manso. O processo de dispersão é modelado através de um sistema de Equações Diferenciais Parciais do tipo Difusão-advecção, com os campos de velocidades apresentando variação no tempo adotados como parâmetro na equação de difusão, consequentemente, contribuiu para a originalidade e ineditismo do modelo encontrado. Também para o domínio escolhido, atribuiu-se as condições de fronteiras variando no espaço e no tempo, o que tornou mais complexo o modelo, porém esta escolha proporcionou maior descrição da realidade e uma nova maneira de estudar este fenômeno, tendo em vista, que até o presente momento, não há trabalhos realizados nesta área, que adotaram estas características descritas anteriormente. Também foi realizada a implementação de um programa computacional com dados reais, isto é, dados coletados no local da pesquisa, o qual, através de algumas simulações foram criados diferentes cenários, que permitiu ilustrar a capacidade qualitativa do modelo, sua abordagem computacional e verificar o comportamento da concentração de dióxido de carbono de forma inédita nesta área escolhida, o que é fundamental para compreender os efeitos da mudança nos ciclos biogeoquímicos globais e regionais, bem como o papel dos ecossistemas terrestres tropicais no balanço de dióxido de carbono neste local.

Palavras-chave: Equação diferencial parcial, elementos finitos, simulação computacional, modelagem matemática.

Abstract

SILVA, B.C. **Modeling and simulation of the dispersion of carbon dioxide in the dam of Manso hydroelectric power plant.** Cuiabá, MT. 2018. 64f. Thesis (Doctorate) – Physics Institute, Federal University at Mato Grosso State.

This thesis presents a study of the problem of dispersion of carbon dioxide in the water-air environment, where the objective is to propose an unprecedented three-dimensional (3D) mathematical model and numerical simulation with scenarios about a region surrounding of Manso hydroelectric power plant. The dispersion process is modeled through a system of partial diffusion-advection differential equations, with velocity fields adopted as a parameter in the Diffusion equation, and they present variation in time, consequently contributing to the originality and novelty of the presented model. Also for the chosen domain, boundary conditions were assigned varying in space and time, which made the model more complex, but this choice provided a greater description of reality and a new way of studying this phenomenon, that up to the present moment, there is no publication done in this area, that adopted these characteristics described previously. It was also carried out the implementation of a computational program with real data, that is, data collected at the research at that location, through some simulations, created different scenarios, which allowed to illustrate the qualitative capacity of the model, its computational approach and verify the behavior of the carbon dioxide concentration unprecedented in this chosen area, which is fundamental to understanding the effects of change in global and regional biogeochemical cycles, as well as the role of tropical terrestrial ecosystems in the carbon dioxide balance at this location.

Keywords: Partial differential equation, finite elements, computational simulation, mathematical modeling.

Introdução

A emissão de carbono para atmosfera na forma de CO_2 tem sido objeto de vários estudos, ampliando os conhecimentos da importância do meio aquático no ciclo do carbono.

Pesquisas realizadas pelo WCD – World Commission on Dams – constituem, na maioria, a base de relatórios das Organizações Não Governamentais – ONGs, que incluem fatos e temas sobre usinas hidrelétricas e, conseqüentemente, formação de grandes lagos. Contudo, mesmo após a construção de 45.000 barragens, bilhões de pessoas estão sofrendo com o suprimento inadequado de água e energia. Porém, estudos têm revelado que barragens e paredes de contenção tem aumentado os danos causados ao meio ambiente em escala mundial. Dos vários problemas detectados, a alteração da concentração de algumas substâncias gasosas na atmosfera é apontada como uma das mais preocupantes. Dentre essas substâncias está presente o CO_2 (Dióxido de Carbono), um dos principais gases presente no efeito estufa.

O dióxido de carbono foi escolhido para o estudo neste trabalho por ser o gás do efeito estufa mais estudado devido o seu volume nas emissões para a atmosfera e representa em torno de 55% do total das emissões de gases causadores do efeito estufa, decorrendo principalmente da queima de combustíveis fósseis e do tempo de sua permanência na atmosfera. Por meio da modelagem matemática, na maioria das vezes, é possível reproduzir as características dos fenômenos ambientais para tratamento de uma determinada questão específica como esta. O estudo da dispersão de poluentes, através da modelagem matemática, tem se mostrado eficiente para o estudo das perturbações globais ou mesmo de ecossistemas em particular (SEKIMURA, 2018).

Neste sentido, é que se propõe o presente estudo do problema da dispersão de poluentes em regiões alagáveis, onde o processo de dispersão ocorre em meios distintos como ar e a água.

O grande interesse sobre o impacto humano na Terra tem trazido muitas questões dentro do foco de interesse público. Uma dessas questões é: qual o impacto da geração de energia hidrelétrica sobre o meio ambiente? Esse tipo de geração de energia foi considerado anteriormente como uma fonte de energia limpa (JOHANSSON,1999).

Resultados obtidos por estudiosos, alegam que os reservatórios hidrelétricos

poderiam contribuir tanto ou até mais para o efeito estufa, quanto a geração de energia com queima de carvão. As estimativas sugerem que, por unidade de energia hidráulica produzida, o fluxo de gás de efeito estufa (GEE) para a atmosfera de alguns reservatórios hidrelétricos pode ser significativo, se comparado à emissão de GEE por geração de eletricidade com combustível fóssil. Em vista disso, muitos estudos foram iniciados para encontrar os fundamentos das emissões de gases de efeito estufa (GEE) dos reservatórios hidrelétricos.

A taxa da emissão de GEE por unidade de eletricidade produzida deve variar de acordo com as características do reservatório, a extensão e o tipo da paisagem inundada e o modo de geração de energia. Para um reservatório com uma baixa taxa de área inundada por energia produzida, a estimativa do efeito estufa, assumindo nenhum sumidouro terrestre antes do enchimento, foi de $0,04 - 0,06 \text{ Tg } CO_2 \text{ TW } h^{-1}$. Para um reservatório com alta taxa, o efeito estufa foi de $0,3 - 0,5 \text{ Tg } CO_2 \text{ TW } h^{-1}$. Essa estimativa é similar ao efeito estufa de geração elétrica por plantas a carvão, segundo os dados mostrados no estudo de Rudd et al., (1993).

Durante o represamento dos reservatórios hidrelétricos, o solo e uma grande quantidade de vegetação são inundados. Pelo menos durante os primeiros anos após o fechamento, a mineralização da matéria orgânica (MO) leva à produção de grande quantidade de CH_4 e CO_2 , que, em parte, são emitidos para a atmosfera (UNESCO, 2009).

Segundo UNESCO(2009), os principais caminhos para emissão de CH_4 e CO_2 por reservatórios são:

- 1) bolhas emitidas nas partes rasas do reservatórios;
- 2) fluxos difusivos pela interface água-ar da superfície do reservatório;
- 3) degaseificação (degassing) pelas turbinas;
- 4) fluxo difusivo a jusante da barragem.

Assim, neste trabalho, escolhemos investigar o problema de fluxo de CO_2 na região do Lago do Manso, onde está inserida a usina hidrelétrica. Nesta região, existe matérias orgânicas inundadas devido ao regime de chuva, elas se decompõem e liberam dióxido de carbono para a atmosfera, conseqüentemente, afeta a distribuição sazonal de energia e carbono dessa região. Até os dias atuais não há trabalhos realizados com estas características mesmo sendo de grande importância o funcionamento desta usina hidrelétrica para a região de Manso e toda a baixada cuiabana.

Sendo assim, propomos um modelo matemático que possa representar a dinâmica do fluxo de CO_2 na atmosfera local. O melhor entendimento da dinâmica do fluxo de CO_2 do solo, ar e água é fundamental para compreender a dinâmica do carbono nos ecossistemas terrestres. Assim, estudos fluxos, emissões e concentrações dos gases do efeito estufa têm sido realizados em diversos biomas, para entender a influência de atividades antrópicas, principalmente, no que diz respeito à liberação de gases poluentes

para a atmosfera, sobretudo a liberação de CO_2 estocado pelas florestas e áreas alagáveis.

Existe uma contínua troca de gás carbônico entre os seres vivos e a atmosfera, tais como: respiração e fotossíntese, materiais da crosta, combustão e oxidação, assim como entre os oceanos e atmosfera. Cerca de 90% da matéria que forma os vegetais são provenientes da atmosfera por meio da atividade fotossintética (VAREJÃO, 2006).

Um modelo matemático é uma abstração da realidade, projetado para realizar uma tarefa específica. Por terem reconhecido as propriedades e técnicas de construção, os modelos matemáticos são técnicas que permitem representar alternativas propostas e simular condições reais que poderiam ocorrer em uma dada realidade. Estes modelos utilizam equações diferenciais parciais (EDP's), que simulam vários cenários ou eventos e preveem ou simulam impactos sendo deles mesmos, de acordo com as hipóteses sobre o sistema que representam, resultantes do que é incluído e do que é excluído (ODI, 2005).

Tais equações, quase sempre, quando possuem uma solução, esta não pode ser expressa em termos de funções elementares.

Com o auxílio de recursos computacionais, via simulação numérica, podemos fazer análises dos fenômenos e tentar explicar as mudanças nas variáveis de interesse. Por meio de algum método numérico, se pode encontrar uma aproximação numérica do modelo, em que as equações são discretizadas utilizando o tal método numérico. Os métodos mais adotados para o tratamento dessas equações diferenciais são o Método de Diferenças Finitas, o Método de Volumes Finitos e o Método de Elementos Finitos, sendo este último o método utilizado neste trabalho.

A seguir, vamos descrever a maneira que esta tese está organizada. No primeiro capítulo, descrevemos conceitos sobre o objeto de estudo (dióxido de carbono), seus impactos ambientais, a importância da modelagem ambiental e a caracterização da área de estudo.

No segundo capítulo, apresentamos a modelagem matemática na sua formulação clássica, com a descrição da equação de difusão-advecção, com as respectivas condições de contorno e condição inicial.

No capítulo 3, expomos a formulação variacional obtida do problema, bem como as discretizações espaciais e temporais do domínio. Utilizando métodos computacionais, a discretização é aplicada no domínio da equação de difusão-advecção, sendo por meio do método de elementos finitos – via Galerkin para a parte espacial e método diferenças finitas de Crank-Nicolson para a discretização temporal, ainda é apresentada a existência e unicidade de solução.

No capítulo 4, descrevemos alguns resultados e discussões através das simulações de cenários, para avaliar a evolução da dispersão do dióxido de carbono, as conclusões sobre o trabalho e propostas para trabalhos futuros. Os algoritmos executados neste trabalho foram elaborados em ambiente MatLab.

Também apresentamos os cenários, que para obtê-los foram substituídos nas

equações diferenciais encontradas para o modelo, os campos de velocidades variando no tempo e as condições de fronteira para o domínio variando no tempo e no espaço, com os dados utilizados nas simulações, isto é, inseridos nas equações do modelo, são dados reais do local, sendo eles de coletas de campo e/ou interpolações devido a poucos pontos de dados coletado.. Desta forma, os resultados obtidos descrevem a realidade do fenômeno no local de estudo. Sendo assim, este trabalho se torna de grande valia para a compreensão deste fenômeno, para a região do Manso, tendo em vista que até o presente momento não há trabalhos realizados com tais características.

Capítulo 1

O dióxido de Carbono

O dióxido de carbono, também conhecido como anidrido carbônico, é um composto químico constituído por dois átomos de oxigênio e um átomo de carbono. A representação química é CO_2 e foi descoberto pelo escocês Joseph Black em 1754.

Estruturalmente, o dióxido de carbono é constituído por moléculas de geometria linear e de carácter apolar. Por isso, as atrações intermoleculares são muito fracas, tornando-o um gás nas condições ambientais. Daí o seu nome comercial gás carbônico. Esse gás é exalado dos seres humanos e dos animais e metabolizado pelas plantas.

A partir da segunda metade do século XVIII até a atualidade, a concentração de CO_2 da atmosfera tem aumentado. Juntamente com o vapor d'água, o dióxido de carbono na atmosfera exerce influência sobre o clima local.

Os principais gases do efeito estufa são o vapor d'água (H_2O) e os chamados gases traço, a saber: dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), óxido nitroso (N_2O), ozônio (O_3), os clorofluorcarbonos (CFCs), pela ordem de participação. Os gases estufa, principalmente o CO_2 , são responsáveis por aprisionar parte dos raios solares que são necessários para manter a temperatura na superfície terrestre a um nível adequado para a nossa existência. O grande problema é que com o aumento da poluição atmosférica, forma-se uma barreira que impede que parte do calor volte para o espaço, ficando aprisionado na atmosfera do nosso planeta e ocasionando o aquecimento global (SANTOS, 1999).

Esses gases, por serem transparentes, permitem a entrada da radiação de ondas curtas através da atmosfera. Entretanto, absorvem aproximadamente 90% da energia da radiação infravermelha proveniente da terra, que é irradiada de volta ao espaço, contribuindo para o aquecimento global.

De acordo com as reais condições meteorológicas os poluentes gasosos e particulados são dispersos, principalmente, pelos parâmetros atmosféricos: direção e velocidade do vento, que é o principal dispersor de poluentes na atmosfera, temperatura do ar e do solo, turbulência e estabilidade atmosférica. A topografia, a rugosidade superficial, o albedo e a altura do lançamento dos poluentes também influenciam no processo de dispersão aérea (MIKKELSEN, 2003).

Desta forma, cientistas caracterizam a poluição do ar com parâmetros importantes que representam o estado real da turbulência atmosférica. Esta turbulência é responsável pela dispersão na atmosfera a diluição dos poluentes na horizontal e na vertical (MOREIRA e TIRABASSI, 2004). Altos níveis de turbulência atmosférica representam condições instáveis onde se observa intensa dispersão dos poluentes na atmosfera, enquanto em condições estáveis os níveis de energia cinética turbulenta são muito menores e a dispersão dos poluentes é suprimida, ocasionando a concentração de poluentes (ALEGRIA, 2006; VAREJÃO, 2006; BOÇON, 1998; PASQUILL, 1974).

A dinâmica do carbono de ecossistemas tropicais brasileiros tem recebido considerável importância, devido a necessidade de compreender os efeitos da mudança da cobertura terrestre, em ciclos biogeoquímicos regionais e globais e o papel dos ecossistemas terrestres tropicais no equilíbrio de CO_2 (VOURLITIS et al., 2004, 2011).

Estima-se que as áreas alagáveis tropicais conhecidas por pântanos, ocupam uma área da superfície do globo entre 5% e 7%. A alta produção primária líquida da matéria orgânica, produzida pela decomposição natural, torna as áreas alagáveis tropicais um importante sorvedouro de carbono. Pequenas alterações no clima, água e regime de nutrientes e uso da terra podem alterar o delicado equilíbrio destas áreas.

Estudos têm sido realizados em diversos biomas, para entender a influência de atividades antrópicas, principalmente, no que diz respeito à liberação de gases poluentes para a atmosfera, sobretudo a liberação de CO_2 estocado pelas florestas e áreas alagáveis. O CO_2 é uma substância que, em conjunto com a radiação solar e com água, é utilizado pelas plantas continuamente para sintetizar a glicose, no processo da fotossíntese (BALDOCCHI, FALGE, GU, OLSON, HOLLINGER, RUNNING, FLUXNET, 2001).

O dióxido de carbono, de forma geral, é produzido no solo pelas raízes e organismos do solo e, em pequena escala pela oxidação de materiais que contêm carbono no solo (RAICH e SCHLESINGER, 1992). A respiração do solo origina-se da decomposição microbiana heterotrófica da matéria orgânica, da respiração autotrófica da rizosfera e da associação micorrízica (HANSEN et al., 2000).

Entre os ecossistemas terrestres, as florestas tropicais têm importante papel no ciclo global do carbono por causa:

- a) Da sua grande extensão: atualmente compreende 43% da área global de florestas, sendo que 52% delas estão na América Tropical;
- b) De seu grande estoque de carbono na vegetação (60% do estoque de C das florestas do mundo) e no solo (com estoque aproximadamente igual ao da vegetação);
- c) De suas altas taxas de emissão de CO_2 devido ao acelerado desmatamento e à conversão da terra para outros usos.

O ciclo do carbono em um ecossistema terrestre de floresta tropical pode ser explicado através do fluxograma da figura 1.1 abaixo.

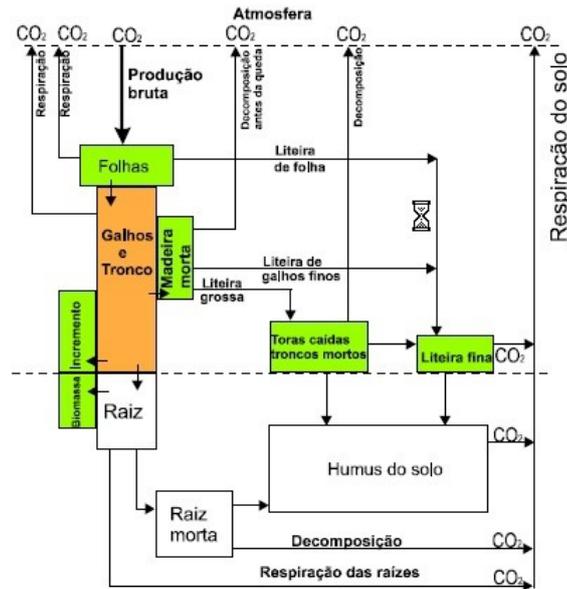


Figura 1.1: Ciclo do Carbono no ecossistema terrestre. Fonte: PINTO-JR, 2007.

Veja também na tabela (1.1) abaixo os gases que compõem a camada da baixa troposfera. SEINFELD, (1986) por DINIZ (2003):

Tabela 1.1: Gases que compõem a Baixa Troposfera
Tabela adaptada de SEINFELD, (1986) por DINIZ (2003)

Gás	Concentração média (ppm) aproximada	Tempo de residência	Ciclo	Situação
Ar	9.340	...	nenhum	(Acumulados ao longo da história da Terra)
Ne	18	...	"	
Kr	1,1	...	"	
Xe	0,09	...	"	
N ₂	780 840	10 ⁶ anos	(biológico e	?
O ₂	209 460	10 anos	microbiológico)	?
H ₂ O	variável	10 dias	de chuvas, etc.	
CH ₄	1,65	7 anos	biogênico	
CO ₂	332	15 anos	antropogênico e biogênico	
CO	0,05–0,2	65 dias	antropogênico e químico	(Equilíbrio ou estado quase estacionário)
H ₂	0,58	10 anos	biogênico e químico	
N ₂ O	0,33	10 anos		
SO ₂	10 ⁻⁵ – 10 ⁻⁴	40 dias	antropogênico e químico	

As trocas ou fluxos de CO_2 representam a quantidade do gás transferido de um reservatório de carbono para outro, devido a processos físicos, biológicos ou químicos (OMETTO, 1981). Para se estimar dentro de um ambiente, coleta-se o ar atmosférico em dois diferentes níveis e mede-se a diferença de concentração do CO_2 . O resultado é, em módulo, o fluxo de CO_2 no ambiente.

Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi determinar o fluxo de gás carbônico numa área da região do Lago do Manso. Para atingir esse objetivo geral, foi necessário:

- 1) Caracterizar do microclima local;
- 2) Criar um modelo que descreva o processo de dispersão do CO_2 para a área de estudo;
- 3) Obter a formulação fraca para o modelo em sua formulação clássica;
- 4) Discretizar o problema em sua formulação fraca e
- 5) Implementar códigos numéricos adequados ao problema para simular cenários e avaliar o perfil da concentração de CO_2 .

1.1 Área de estudo: Lago do Manso e regiões afluentes

Na Chapada dos Guimarães também tem paraísos artificiais, sendo o maior deles o lago do Manso. A área é inundada com as águas represadas da hidrelétrica do Rio Manso, principal afluente do Rio Cuiabá, que serve de elo entre os municípios de Cuiabá e Várzea Grande, formando o aglomerado urbano do Estado de Mato Grosso.

O lago fica distante de Cuiabá cerca de 100 km, formado pela barragem do rio Manso com uma área aproximada de $427km^2$. Já a Usina Hidrelétrica de Manso está localizada em Mato Grosso, uma parte dela no município de Chapada dos Guimarães e outra no município de Nova Brasilândia, às margens do Rio das Mortes e tem capacidade de geração de 212 MW. A barragem foi inaugurada no ano de 2000 e tem extensão de 3680 metros. No local da Barragem, o rio Manso controla uma área de drenagem de $9.183,86 km^2$ e representa cerca de 40% da bacia do rio Cuiabá. O principal afluente do rio Manso é o rio Casca cuja área de drenagem representa aproximadamente 45% da área de drenagem total do rio Manso no APM Manso. A bacia do rio Casca é formada por uma camada de solo conlúvio/residual arenoso com alta porosidade – porosidade efetiva da ordem de 20%, alta permeabilidade e por formações areníticas, subjacentes, com porosidade mais reduzida e baixa permeabilidade. Em razão destas características geológicas, com solos de grande porosidade, o rio Casca apresenta no período da estiagem,

descargas específicas extremamente elevadas em comparação com as dos outros rios da região (GRAFODI, 2006). A sub-bacia do rio Manso, montante da foz do rio Casca, com área de drenagem de 4.251km^2 , cerca de 55% da área controlada pela barragem, possui solos de baixa permeabilidade que, durante o período chuvoso, contribuem para a formação de cheias nos rios Manso e Cuiabá e, no período da estiagem, proporcionam descargas extremamente reduzidas (GRAFODI, 2006). Na figura 1.2 vemos a localização do reservatório de Manso e da Bacia do Rio Manso.

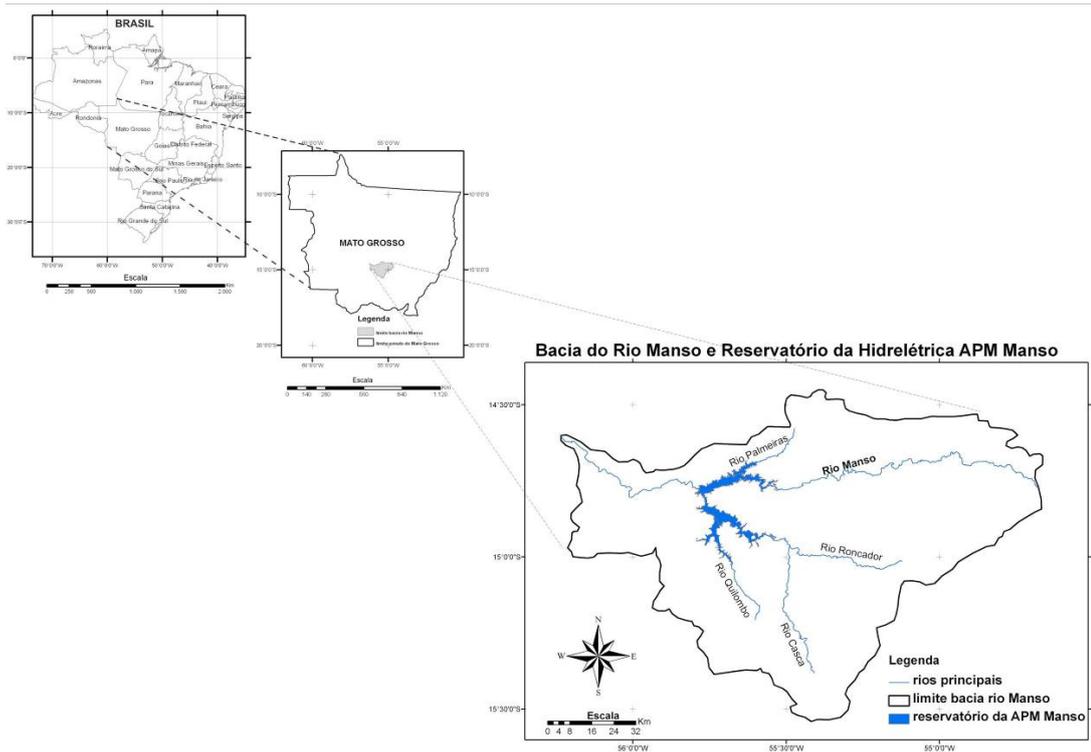


Figura 1.2: Localização do reservatório de Manso e da Bacia do Rio Manso em Mato Grosso. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2018.

Como sempre ocorre em construção de barragens, a obra da usina e do reservatório, iniciada no final dos anos de 1980 e concluída em 2001, causou descontentamento de especialistas em impacto ambiental e social na parte rural do município de Chapada dos Guimarães. A implantação da usina de Manso, foi planejada no final da década de 70, pelo contrato firmado em 28 de maio de 1980 com a Companhia Auxiliar de Empresas Elétricas Brasileiras - CAEEB, ficando a Sondotécnica S.A encarregada de realizar estudos e serviços técnicos especializados, cujo objetivo seria a elaboração de um plano diretor para o desenvolvimento integrado do vale do rio Cuiabá. O Plano diretor foi constituído no sentido de atender aos seguintes objetivos:

i) Suprimir de energia elétrica a região de Cuiabá, pois a partir de 1986 era necessário a introdução de novas fontes de suprimento de energia para evitar o colapso do sistema;

ii) Proteção ao vale e a cidade de Cuiabá contra inundações: onde a vazão máxima admissível do rio Cuiabá foi limitada em $2.300 \text{ m}^3/\text{s}$. Mediante os estudos, foi concluído que a construção isolada da barragem de Manso garantiria o controle para tempo de ocorrência de cerca de 50 anos, isto é, o plano prevê que a barragem pode impedir inundações num parzo de vida útil por cerca de 50 anos.

iii) Trazer melhoria nas condições de navegação do rio Cuiabá, principalmente no período de estiagem;

vi) Abastecer de água a cidade de Cuiabá para fins domésticos e industriais;

v) Preservar a qualidade das águas do rio dentro das normas da FEMA;

vi) Suprimir água para irrigação de áreas com potencial agrícola: onde foi identificado uma área de 50.000 ha. potencialmente aproveitável para fins agrícolas com auxílio de sistema de irrigação.

As obras da barragem de Manso foram iniciadas no final dos anos 80 e logo em seguida paralisadas por falta de recursos, e reiniciada somente em meados de 98 pelo consórcio entre as empresas de engenharia Odebrecht, Servix e Persa, com cerca de 70 por cento do financiamento por Furnas Centrais Elétricas, operadora da usina.

Segundo Chiletto, (2005) a região concebida para a usina abrange uma barragem principal de terra e entroncamento, com 3.660 m de extensão e altura máxima de 72 m, contendo o vertedouro principal de superfície, controlados por três comportas de seguimento e tomadas d'água do tipo gravidade, que faz a captação e a adução da água, por quatro condutos forçados até as unidades de geração.

O reservatório se estende por 66 km^2 do município de Cuiabá, 263 km^2 do município de Chapada dos Guimarães e 58 km^2 do município de Nova Brasilândia e ocupa por cerca de 50 km, a leste e sudeste, em direção às nascentes dos rios Manso e Casca. Dispondo de um volume total de água de cerca de 7,4 bilhões de m^3 e uma área total de 427 km^2 no máximo normal de operação, cota 287,00 m.

O primeiro gerador de Manso começou a operar no dia 8 de dezembro de 2000. Criada pela parceria de FURNAS com o consórcio privado Proman. A usina funciona plenamente desde abril de 2001, gerando potência instalada de 212 MW ($4 \times 52,5 \text{ MW}$), o suficiente para abastecer uma cidade com 1,2 milhões de habitantes. Veja a figura 1.3 a imagem de parte da usina abaixo.



Figura 1.3: Usina Hidrelétrica de Manso. Fonte: Furnas, 2018.

O rio Cuiabá tem como um de seus principais afluentes o rio Manso, este, responsável por uma área de drenagem de $9.183,86\text{km}^2$, representando aproximadamente 40% da bacia do rio Cuiabá e, cerca de 2% da bacia hidrográfica que forma o Pantanal. A barragem que forma o reservatório está implantada à jusante da ligação do rio Casca com o rio Manso, nas coordenadas geográficas $14^{\circ}52'$ de latitude sul e $55^{\circ}48'$ de longitude oeste.

Segundo dados da estação de Cuiabá, região onde está localizada o reservatório de Manso, apresenta dois períodos distintos durante o ano. O período mais seco, que compreende os meses de maio a setembro, com valores médios de precipitação de $29,8\text{ mm/mês}$ e temperatura média de $24,3^{\circ}\text{C}$, e o período mais chuvoso, nos meses de outubro a abril, com precipitação média de $166,6\text{ mm/mês}$ e temperatura média de $26,5^{\circ}\text{C}$ ROCHA (2009).

Durante o período seco, é comum observar baixos valores de umidade relativa do ar, em torno de 20%, e valores elevados de temperatura do ar, chegando a 40°C , quando há influência de uma massa de ar quente e seca. Na atuação do fenômeno da friagem, quando massas de ar polares (frias e secas) atingem a região, principalmente durante os meses de inverno, a temperatura pode chegar abaixo de 10°C .

Durante o período chuvoso, a atuação da Alta da Bolívia em altos níveis da atmosfera (200hPa) (hPa - hecto Pascal) e o transporte de umidade da região amazônica em baixos níveis da atmosfera (850hPa) são os principais responsáveis pela precipitação na região.

O fenômeno ambiental Alta da Bolívia é um anticiclone que ocorre na alta troposfera no verão sobre a América do Sul. O padrão de circulação do verão na alta troposfera mostra a formação de um anticiclone sobre a parte central na América do Sul e um cavado no nordeste brasileiro (CARVALHO, 1989).

1.2 Área inundada

A evolução da lâmina d'água no local onde hoje se situa o reservatório de Manso ocorreu de modo bastante rápido (Figuras 1.4 e 1.5), pois em setembro de 1999 (pré-enchimento) a mesma não ultrapassava a $6km^2$ e em maio de 2000 já chegava a cerca de $178km^2$, ou seja, um crescimento extremamente rápido das áreas inundadas de cerca de $172km^2$ em aproximadamente 7 meses, retratando bem o período de maior represamento da água para enchimento do reservatório. Já entre maio e dezembro de 2000, decorrido praticamente o mesmo intervalo de tempo a lâmina d'água avançou apenas mais $26km^2$, totalizando $204km^2$ de área inundada, indicando desse modo a fase de estabilização do crescimento da lâmina d'água do reservatório de Manso. Contudo, apesar de mais lento, o crescimento da lâmina d'água do reservatório de Manso continuou até alcançar $427km^2$ em 2006 (SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013).

Tomando como limite da área analisada a lâmina d'água do reservatório em dezembro de 2002 ($327,67km^2$), quando o crescimento do mesmo já estava estabilizado, nota-se que a cobertura da terra na área por ele inundada em dezembro de 1999 era composta originalmente, sobretudo, pela vegetação de cerrado ($139km^2$), que representava cerca de 42% da área delimitada por essa lâmina d'água. Observa-se também que a maior parte da vegetação (62%) existente nessa área inundada era representada por fitomassa arbórea/arbustiva apurada com a soma das classes mata e cerrado. Deve-se chamar atenção, ainda para a significativa área que era ocupada por pastagens ($63,7km^2$) que representava 19% dessa área inundada (SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013). Veja as figuras 1.4 e 1.5 a seguir.

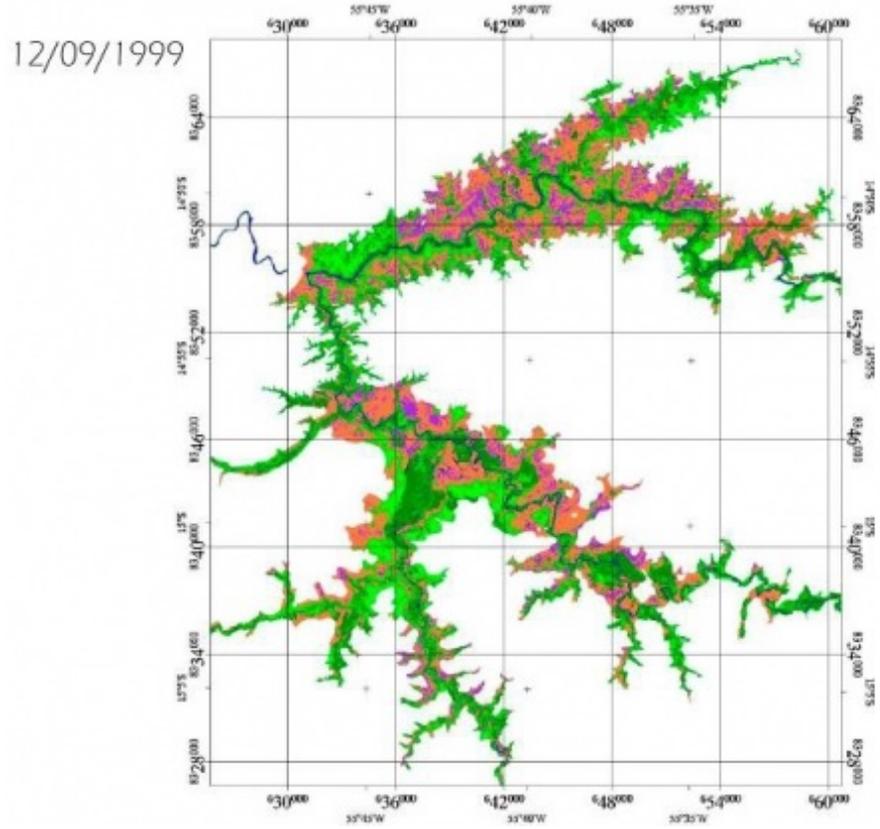


Figura 1.4: Área inundada do Reservatório de Manso em set/1999. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013.

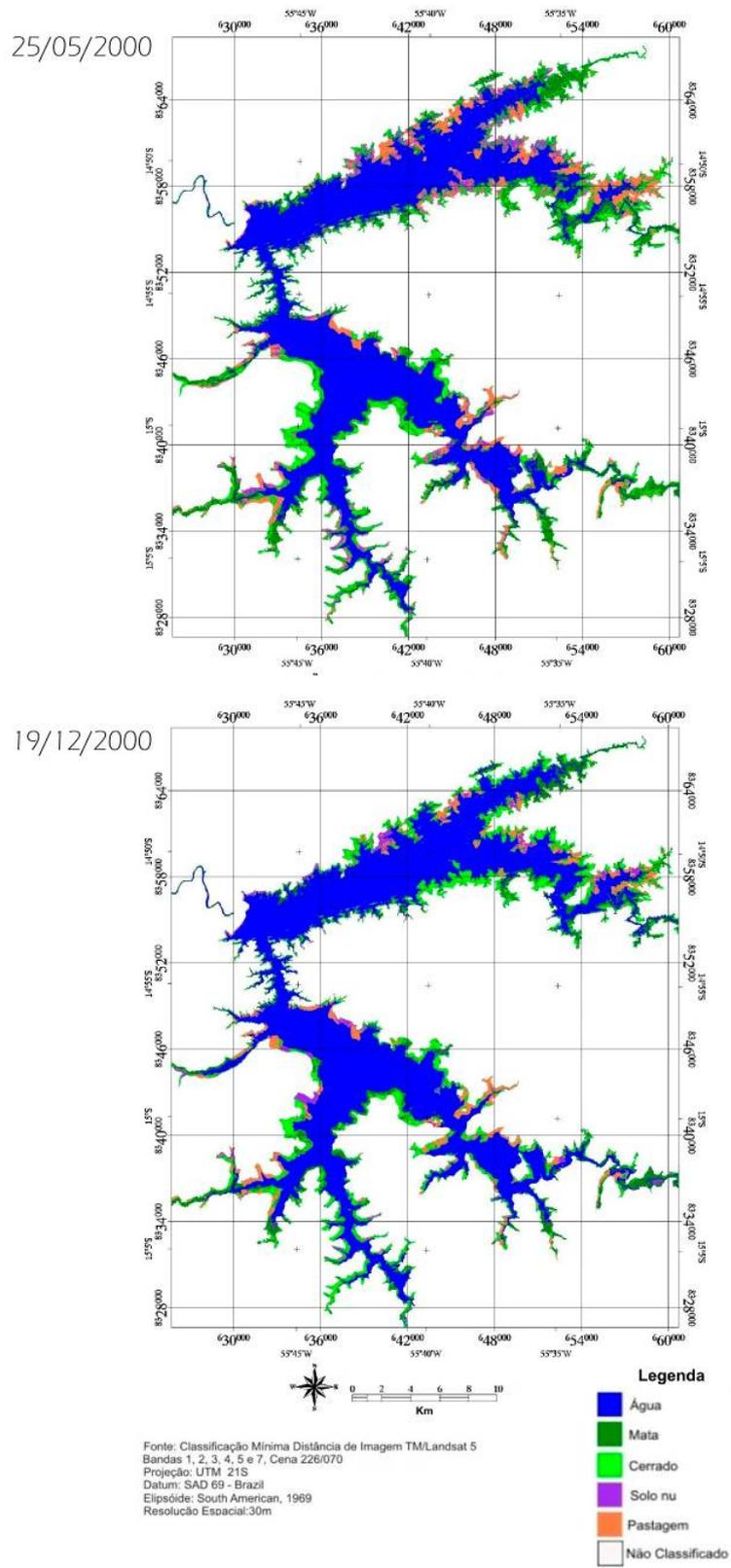


Figura 1.5: Evolução da área inundada do Reservatório de Manso no período de mai/2000 a dez/2000. Fonte: SANTOS, OLIVEIRA, SOUZA, 2013.

Capítulo 2

O Problema e a Formulação do Modelo

2.1 O Problema

A modelagem da dispersão de dióxido de carbono apresenta o desafio de obter-se conhecimento sobre o comportamento desse gás no ambiente e usar este conhecimento para fazer as simplificações necessárias na implementação do modelo. As dificuldades na obtenção de medidas do carbono nessa região de estudo ainda é um desafio, ou pelas dimensões envolvidas ou pelos processos pelos quais o gás é produzido e emitido para a superfície.

O dióxido de carbono é liberado para a atmosfera por meio de vários fatores como a queima de combustíveis fósseis e mudanças no uso da terra, por exemplo: desmatamentos e queimadas, principalmente impostas pelo homem, constituem importantes alterações nos estoques naturais de carbono e tem um papel fundamental na mudança do clima do planeta. Outros grandes emissores são a produção de cimento e aço, refinaria de petróleo e indústria petroquímica. Por exemplo, o ácido acrílico, um importante monômero é produzido em uma quantidade de mais de 5 milhões de toneladas/ano. O desafio no desenvolvimento desses processos é encontrar um catalisador adequado e condições de processo que maximizem a formação do produto e minimizem a produção de CO_2 . O excesso de dióxido de carbono que atualmente é lançado para a atmosfera resulta da queima de combustíveis fósseis, principalmente, pelo setor industrial e de transporte. Além disso, reservatórios naturais de carbono e os sumidouros (ecossistemas com a capacidade de absorver CO_2) também estão sendo afetados por ações antrópicas. Devido o solo possuir um estoque 2 a 3 vezes maior que a atmosfera, mudanças no uso do solo podem ser importantes fonte de carbono para a atmosfera.

Nos reservatórios, os níveis de oxigênio definem se CH_4 ou CO_2 serão produzidos ou emitidos quando a matéria orgânica é produzida, também a idade dos reservatórios afeta os fluxos de emissão de gases de efeito estufa, com maior emissão em reservatórios mais jovens em comparação com os antigos, isto devido a matéria orgânica recém inun-

dada, como folhas e lixos, que decompõem-se mais rapidamente que carbono mais velho e robusto, como a turfa e o carbono em solos. Também a temperatura alta tem o potencial de aumentar os processos biológicos, incluindo a decomposição da matéria orgânica por bactérias, que permite a liberação de CO_2 para a atmosfera.

Uma função comum a todos os ecossistemas terrestres é a sua capacidade de emitir e sequestrar carbono atmosférico e, diante disso, é preciso compreender como o lago do Manso e região circunvizinha emite e sequestra o carbono atmosférico, pois sabemos que existe uma complexa variedade de processos físicos, químicos e bióticos, atuando em direções ou intensidades diferentes. Mas, para realmente entender o papel atual dessa região no futuro do balanço do carbono atmosférico, seria necessário também conhecer e entender todos esses processos, sua direção e importância relativa.

Dar respostas às indagações sobre o papel dos distintos ecossistemas no ciclo do carbono e se estes, de fato, são um sorvedouro do mesmo, faz-se necessário monitorar os fluxos verticais de CO_2 , respiração do solo e todos os outros parâmetros que possam ter correlação com os mesmos, de modo a quantificá-los e relacioná-los BRANDÃO, (2012).

Desta maneira, será possível verificar quais as interações físicas e químicas entre o solo, a vegetação e a atmosfera e quais as consequências no sistema de circulação atmosférica que compõem o clima, quando se constrói uma usina hidrelétrica e muda algumas dinâmicas naturais do local.

Algumas técnicas recentes são usadas para estimativa do CO_2 na atmosfera e sua implicação nas mudanças climáticas globais. A quantidade futura de CO_2 dependerá da capacidade dos sorvedouros deste gás em absorver parte do CO_2 liberado pelas diversas fontes, tanto naturais quanto antropogênicas. Para avaliar esta capacidade deve-se conhecer o tamanho, localização e natureza destes sorvedouros de carbono, prevendo suas respostas às mudanças futuras no conteúdo de CO_2 atmosférico, uso da terra e clima. Vários são os componentes da emissão de CO_2 na atmosfera. O objetivo deste trabalho foi verificar a dinâmica temporal do fluxo de CO_2 do solo nessa área. Abaixo segue a tabela 2.1 que apresenta alguns trabalhos acadêmicos realizados sobre o fenômeno da dispersão de poluentes.

Tabela 2.1: Histórico dos trabalhos realizados

Autor	Dimensão	Tipo do Domínio	Meio	Campos de velocidades	Condições de Fronteiras
MISTRO, (1992)	\mathbb{R}^2	retângulo	água	constante	constante
WOLMUTH, (2009)	\mathbb{R}^2	mapa	água	constante	constante
BERNARDES, (1998)	\mathbb{R}^2	mapa	água	constante por partes	constante
CANTÃO, (1998)	\mathbb{R}^2	mapa	água	interpolação de dados	constante
DINIZ, (2003)	\mathbb{R}^2	retângulo	água e ar	perfil parabólico	constante
INFORZATO, (2008)	\mathbb{R}^3	paralelepípedo	água e ar	Stokes	constante
KRINDGES, (2011)	\mathbb{R}^3	mapa 3D	água	Navier-Stokes	constante
CARILA, (2018)	\mathbb{R}^3	mapa 3D	ar	variação temporal	variação temporal

2.2 Modelos Matemáticos

Neste trabalho vamos estudar quais são os conceitos básicos envolvidos no processo da modelagem matemática de sistemas. Os modelos matemáticos são de grande importância para a ciência e a engenharia em geral, especialmente a partir do instante em que o computador digital veio simplificar significativamente a tarefa do cálculo numérico.

Um modelo matemático é uma representação conceitual; uma idealização da situação real. Há basicamente, três abordagens diferentes para a obtenção dos modelos matemáticos: a fenomenológica, baseada na aplicação de princípios fundamentais, a empírica, baseada em dados experimentais e a híbrida, uma combinação ponderada das duas anteriores. A modelagem fenomenológica se baseia em princípios básicos de conservação e em relações constitutivas. A sua construção é um processo iterativo de ajustes sucessivos.

2.3 Formulação do Modelo

Neste trabalho descreveremos um modelo matemático para o problema a ser estudado em sua formulação clássica. Buscaremos obter através da modelagem

matemática um modelo caracterizado por equação diferencial e as condições de contorno, que simula o transporte e a difusão do dióxido de carbono.

A equação a ser utilizada é conhecida por equação de difusão-advecção, que modela fenômenos relacionados a dispersão de poluentes em sistema lacustres e está associada a análises em ecologia matemática e situações gerais. Tem sua origem nas leis de conservação de massa.

Um modelo geral para o nosso estudo é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(\text{fluxo}) + \text{decaimento} = \text{fonte} \quad (2.1)$$

Na equação acima denotamos por $u(x, y, z, t)$ a concentração de CO_2 no ponto (x, y, z) , sendo que x representa a longitude, y representa a latitude, z representa a altitude e t o instante de tempo, com $(x, y, z, t) \in \Omega \times (0, T]$. Com $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. O segundo termo pode ser descrito genericamente por:

div(fluxo) = difusão + advecção

Desta forma, temos em termos da modelagem clássica:

difusão = $\text{div}[\alpha \nabla u]$, (cf. OKUBO, 1980)

transporte = $\text{div}[\vec{V}u]$, (cf. DINIZ, 2003)

decaimento = $\text{cte}.u = \sigma u$, (cf. BASSANEZI, (2002)

Então a equação denominada *equação de transporte* que modela o fenômeno da dispersão de um determinado poluente, neste caso, a concentração de CO_2 , é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}[\alpha \nabla u] + \text{div}[\vec{V}u] + \sigma u = f \quad (2.2)$$

com,

$\alpha = \alpha_u(x, y, z, t)$, o coeficiente de difusibilidade efetiva no meio;

$\vec{V} = \vec{V}(x, y, z, t)$, o campo de velocidades no meio aéreo;

$\sigma = \sigma_u(x, y, z, t)$, a taxa de degradação global no meio aéreo.

$f = f(x, y, z, t)$, é o termo fonte de CO_2 .

Na equação (2.2) o termo $\text{div}[\alpha \nabla u]$ está representando a difusão para o meio, ou seja, o espalhamento natural devido a movimentos moleculares ou movimentos relacionados à turbulência, depende do próprio gás neste caso, da posição, do tempo, da

temperatura; o termo $div[\vec{V}u]$ modela o transporte advectivo, relacionado a agentes externos, neste caso o transporte de dióxido de carbono, seguindo a direção dada pelo vetor das correntes de ventos dominantes, o termo σu está ligado a fenômenos relacionados a alterações sofridas pelo gás ao reagir com o meio externo com o passar do tempo, perdendo massa e excluindo-se do meio.

A solução de qualquer equação diferencial dependente do tempo requer a especificação de condições na fronteira do sistema estudado e condições de início do processo físico.

2.3.1 O fluxo J

Pelas leis da física, a dispersão de uma substância num determinado meio é a ação conjunta dos seguintes processos:

2.3.1.1 Difusão

A difusão microscópica de uma substância é constituída pelo movimento Browniano das suas moléculas. Esta e a difusão macroscópica devida à tensão superficial, constituem a difusão chamada de efetiva por Marchuk (1986) ou por Okubo (1980). Pela lei de Fick assumimos que a matéria tem uma tendência a se espalhar de tal forma a ocupar o espaço físico da maneira mais regular possível, o que equivale a dizer que a matéria se movimenta de locais de maior concentração para os de menor concentração. Assim, é razoável supor que a variação da concentração se dá na clássica forma:

$$J_1(t, x) = -\alpha(t, x, u)\nabla u(t, x),$$

Sendo o gradiente de u considerado apenas em relação às coordenadas espaciais, $\alpha(t, x, u)$ representa o valor da difusibilidade efetiva no meio, na posição x e no instante t . É natural intuir que, em determinadas situações e em locais onde a concentração é maior, as partículas experimentem uma menor difusibilidade, daí que este parâmetro possa também depender da própria concentração $u = u(t, x)$.

2.3.1.2 Advecção

A advecção é o movimento provocado por agentes externos, como o campo de velocidades do meio. No nosso caso específico, correntes induzidas por forçantes tais como ventos. Se o agente externo que provoca o movimento da substância é definido por um campo de velocidades V , em geral, variável tanto na posição como no tempo, então o fluxo advectivo será proporcional à concentração:

$$J_2(t, x) = V(t, x)u(t, x).$$

Assim, o fluxo por difusão efetiva e transporte advectivo é dado por:

$$J(t, x) = J_1(t, x) + J_2(t, x) = -\alpha(t, x, u)\nabla u(t, x) + V(t, x)u(t, x).$$

2.3.1.3 Degradação

A degradação é também conhecida como decaimento e, é um processo que ocorre a nível de partículas, constituído pelas alterações sofridas pela substância ao longo do tempo devido entre outras causas, a fotodegradação, biodegradação e precipitação. Em muitas situações, assume-se que a perda de substância é linearmente proporcional à própria quantidade presente no meio.

2.3.1.4 Fontes

Fontes e sorvedouros são os meios pelos quais a substância é introduzida e retirada do meio respectivamente. Por exemplo, os emissários (denominados no meio como dispersares) através dos quais é despejado o esgoto das cidades em meios aquáticos são um caso específico de uma fonte (poluente).

2.4 Condições de Contornos

No ramo de equações diferenciais, um problema de valor sobre o contorno é um sistema de equações diferenciais provido de um conjunto de restrições adicionais, as chamadas condições de contorno ou condições de fronteira. Uma solução para um problema de valor sobre o contorno é a solução do sistema de equações diferenciais que satisfaz as condições de contorno.

Problemas de valor sobre o contorno surgem em diversos ramos da física. Problemas envolvendo a equação de onda, bem como a determinação dos modos normais, são frequentemente classificados como problemas de valor sobre o contorno.

Para que seja útil em aplicações, um problema de valor sobre o contorno deve ser bem posto. Isto é, estabelecidas determinadas condições para o problema, haverá então solução única, que depende continuamente das condições envolvidas.

As condições de contorno, neste caso, serão consideradas como as de Robin ou de von Neumann, em função da passagem de gás pela fronteira, dadas por

- Condição de Robin

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma} = \kappa u, \forall t \in (0, T]$$

onde temos que:

α representa o coeficiente de difusibilidade;

η é a normal exterior unitária à fronteira;

κ é a taxa de passagem do gás pela fronteira devido a diferença de concentração entre os meios;

u é a concentração de metano nos pontos da fronteira; Γ é a fronteira do domínio Ω .

A condição de contorno de Robin é uma condição de contorno híbrida, é a combinação linear de condições de contorno de Dirichlet e de Neumann.

- Condição de von Neumann homogênea

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma} = 0, \forall t \in (0, T]$$

sendo,

- η é o vetor normal exterior unitário ao longo do domínio Γ ;
- α representa o coeficiente de difusibilidade.

- Condição de von Neumann não-homogênea

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma} = g(x, y, z, t), \forall t \in (0, T]$$

em que $g(x, y, z, t)$ é uma função dada.

Capítulo 3

Formulação Variacional para a Equação Clássica e Discretização

3.1 Formulação Variacional

Neste capítulo apresentamos a formulação variacional do problema na sua formulação clássica e soluções via o Método dos Elementos Finitos para aproximar numericamente a solução do modelo, ou seja, obteremos a formulação variacional do problema da equação (2.2) descrita no capítulo anterior, para a qual será proposta uma solução denominada fraca, isto é, introduzir as derivadas no sentido das distribuições, que no campo variacional possibilitam obter com maior simplicidade os resultados de existência e unicidade de solução, a ser procurada num espaço métrico conveniente. Assim, na nova formulação podemos reduzir a ordem da equação diferencial do problema e, ainda, obter solução muito próxima da formulação variacional clássica.

Obtida a formulação fraca ou variacional, é feita uma discretização no domínio do problema, aproximando a solução fraca por uma apropriada função contínua por partes fazendo, com isto, um problema de EDP reduzir-se à a resolução de sucessivos sistemas de equações lineares algébricas. Para isso exige-se que:

Consideremos um sub-espaço do espaço H^1 chamado de espaço de Sobolev, denotado por ϑ , das funções teste, cujas as derivadas parciais também serão fracas.

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

sendo L^2 é o espaço das funções de quadrado integrável, no sentido de Lebesgue. Definido por:

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \text{ com } \iint_{\Omega} [v(x, y, z)]^2 d\mu < \infty \right\},$$

tal que

$$\vartheta \subset H^1(\Omega).$$

Para obter a formulação variacional se faz o seguinte processo:

- i) Consideram-se as derivadas da equação (2.2) no sentido de distribuições;
- ii) Efetua-se o produto interno de cada termo das equações por uma função v , denominada função teste, sendo esta pertencente ao sub-espço ϑ .

Em ϑ o produto interno é definido da seguinte maneira:

$$(f|g)_{\Omega;0} = \int_{\Omega} fg d\mu \quad (3.1)$$

$$(\vec{f} || \vec{g})_{\Omega} = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{g} d\mu \quad (3.2)$$

$$\langle f|g \rangle_{\Omega;0} = \int_{\Gamma} fg d\gamma \quad (3.3)$$

Agora, prosseguimos efetuando a multiplicação da equação (2.2) por uma função teste não nula, $v \in \vartheta \subset H^1(\Omega)$ e integrando a equação resultante no sentido de Lebesgue sobre o domínio Ω e considerando as condições dadas, segue que:

$$\int_{\Omega;0} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu - \alpha \int_{\Omega;0} \Delta u v d\mu + \int_{\Omega;0} \nabla(Vu) v d\mu + \int_{\Omega;0} \sigma v d\mu = \int_{\Omega;0} f v d\mu,$$

em que, consideremos que as componentes advectivas, isto é, o transporte do meio aéreo, sejam V_x , V_y e V_z , temos

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega;0} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu - \alpha \int_{\Omega;0} \Delta u v d\mu + V_x \int_{\Omega;0} \frac{\partial u}{\partial x} v d\mu + \\ & V_y \int_{\Omega;0} \frac{\partial u}{\partial y} v d\mu + V_z \int_{\Omega;0} \frac{\partial u}{\partial z} v d\mu + \int_{\Omega;0} \sigma u v d\mu = \int_{\Omega;0} f v d\mu \end{aligned} \quad (3.4)$$

Aplicando o produto interno dado pelas equações (3.1) a (3.3), ficamos com

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \middle| v \right)_{\Omega;0} - \alpha (\Delta u | v)_{\Omega;0} + V_x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \middle| v \right)_{\Omega;0} + \\ & + V_y \left(\frac{\partial u}{\partial y} \middle| v \right)_{\Omega;0} + V_z \left(\frac{\partial u}{\partial z} \middle| v \right)_{\Omega;0} + \sigma (u | v)_{\Omega;0} = (f | v)_{\Omega;0} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Usando a primeira identidade de Green, (Iório e Iório, 1988) no segundo termo do lado esquerdo da equação (3.5), para os operadores aqui analisados:

$$-\alpha(\Delta u|v)_{\Omega;0} = \alpha(\nabla u|\nabla v)_{\Omega;0} - \alpha\langle u|v\rangle_{\Gamma}$$

substituindo na equação (3.5), nos fornece a expressão

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u}{\partial x}\Big|v\right)_{\Omega;0} + \alpha(\nabla u|\nabla v)_{\Omega;0} + V_x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\Big|v\right)_{\Omega;0} + \\ & + V_y\left(\frac{\partial u}{\partial y}\Big|v\right)_{\Omega;0} + V_z\left(\frac{\partial u}{\partial z}\Big|v\right)_{\Omega;0} + \kappa\langle u|v\rangle_{\Gamma} + \sigma(u|v)_{\Omega;0} = (f|v)_{\Omega;0} \end{aligned} \quad (3.6)$$

A equação (3.6) é conhecida como formulação variacional ou formulação fraca do problema.

3.2 Existência e Unicidade da Solução Fraca

A fim de construir métodos para aproximar a solução de 3.6 precisamos garantir a existência e unicidade da solução procurada. Considerando a formulação variacional do problema obtido, para tal propósito usaremos o Teorema de Lions LIONS (1961) e seguindo procedimentos adotados por: DINIZ (2003), OLIVEIRA (2003), CASTRO (1993) e MISTRO (1992).

Teorema de Lions: Dados o conjunto aberto limitado de fronteira Lipschitz contínua simplesmente conexo, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e os espaços de Hilbert H e V tais que: $V \subset H$, sendo esta inclusão contínua, e com V denso em H , tal que: dado $T > 0$ (fixo), seja a uma família em $t \in [0, T]$ de formas sesquilineares definidas em $V \times V$:

$$a(t; u, v) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$$

satisfazendo as seguintes hipóteses:

1. $\forall (u, v) \in V \times V$, a função $t \rightarrow a(t; u, v)$ é mensurável,
2. $|a(t; u, v)| \leq M\|u\|_V\|v\|_V$, q.t.p em Ω , $t \in [0, T]$, $\forall u, v \in V$, sendo M uma constante,
3. existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que $a(t; u, v) + \lambda\|v\|_H^2 \geq \beta\|v\|_V^2$, q.t.p em Ω , $t \in [0, T]$, $\forall u, v \in V$, sendo β uma constante, estritamente positiva,
4. dadas $u_0 \in H$ e $f \in L^2((0, T]; H)$, existe uma única função $u \in L^2((0, T]; H)$ tal que $\left(\frac{du}{dt}\Big|v\right)_{L^2(\Omega)} + a(t; u(t), v) = (f(t)|v)_{L^2(\Omega)}$, q.t.p., em Ω $t \in (0, T]$, $\forall v \in V$

$$(u(0)|v)_{L^2(\Omega)} = (u_0|v)_{L^2(\Omega)} \quad \forall v \in V.$$

A demonstração deste teorema encontra-se em LIONS (1961) e de um modo geral para o caso em que a é não linear MEYER (1997) faz a demonstração para um problema similar.

3.3 Estabilidade Numérica

No problema apresentado, temos a equação evolutiva denominada “de transporte”. Os métodos de aproximação numérica para a solução de equações evolutivas, podem acarretar sérias dificuldades de estabilidade. As instabilidades numéricas podem ocorrer em uma aproximação como a apresentada neste trabalho, quando o termo advectivo torna-se preponderante na equação, isso se dá quando as dimensões da malha ultrapassarem um determinado valor ou quando o valor de V for muito maior que o de α para o caso constante (HEINRICH J. C; MITCHELL; ZIENKIEWICZ, 1977). Assim, o sistema é mal condicionado devido a matriz associada ao termo advectivo ser assimétrica, podendo ser contornado com o uso de malhas refinadas, de maneira que a convecção/advecção perca sua preponderância em termos de elementos, neste caso, exige um alto custo computacional, devido a ordem das equações diferenciais do sistema passar a ser obtido, tornar bem maior, após refinada a malha. Um meio de verificar as oscilações que aparecem no sistema é através da conhecido condição de Peclet, que fornece uma condição sobre a discretização do domínio suprimindo o efeito das oscilações numéricas. O valor do número de Peclet é dado por

$$P_e = \frac{V_i \Delta x_i}{\alpha} \leq 2$$

sendo

V_i a componente do termo advectivo V na direção x_i

Δx_i o comprimento máximo do intervalo de x_i

α o coeficiente de difusão.

As simulações a serem realizadas para este trabalho deverão respeitar as condições de Peclet.

3.4 Formulação Variacional do Problema - Manso

Nesta seção vamos construir a formulação variacional do modelo para o caso da região do Manso. Da equação (3.6) que representa a Formulação Variacional no \mathbb{R} . Reescrevendo-a de forma compacta, temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla(\alpha_u \nabla u) - \nabla \cdot (\vec{V}u) - \sigma_u + f$$

e, usaremos as condições de contorno de Robin, em que consideramos que existe uma perda de CO_2 para as laterais do paralelepípedo, incluindo a emissão para a atmosfera. Essas perdas são proporcionais à quantidade presente na respectiva fronteira:

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_i} = k_i u \quad \text{com } i = 3, \dots, 7 \quad \text{e } k_i \text{ constante.} \quad (3.7)$$

E a de von Neumann não homogênea, para as fronteiras inferiores do domínio, pois ocorre o ingresso do CO_2 , isto é, através da emissão de CO_2 pela água do lago e emissão pelo solo.

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_j} = g(x, y, z, t) \quad \text{com } j = 1, 2. \quad (3.8)$$

Multiplicando por v uma função teste em que $v \in \mathcal{V} \subset H^1(\Omega)$ e integrando, temos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\alpha \nabla u) v d\mu + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\vec{V}u) v d\mu + \int_{\Omega} \sigma u v d\mu = \int_{\Omega} f v d\mu$$

usando a identidade: $\nabla \cdot (\vec{V}u) = (\nabla \vec{V})u + \vec{V} \cdot \nabla u = \vec{V} \cdot \nabla u$, na terceira parcela da equação acima, vem:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu - \alpha \int_{\Omega} \nabla(\nabla u) v d\mu + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla u) v d\mu + \sigma \int_{\Omega} u v d\mu = \int_{\Omega} f v d\mu \quad (3.9)$$

Reescrevendo o segundo termo da equação (3.9), $-\alpha \int_{\Omega} \nabla(\nabla u) v d\mu$, temos:

$$-\alpha \int_{\Omega} \nabla(\nabla u) v d\mu = \alpha \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) d\mu - \alpha \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \eta} v d\partial\Omega$$

sendo, $\partial\Omega = \bigcup_{j=1}^7 \Gamma_j$.

Aplicando as condições de fronteiras de (3.7) e (3.8), na segunda parcela do segundo termo na expressão acima, ficamos com:

$$-\alpha \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \eta} v d\partial\Omega = - \sum_{m=1}^2 \int_{\Gamma_m} g v d\partial\Omega + \sum_{m=3}^7 k_m \int_{\Gamma_m} u v d\partial\Omega$$

Assim, substituindo na equação (3.9), obtemos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu + \alpha \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) d\mu - \sum_{m=1}^2 \int_{\Gamma_m} g v d\partial\Omega + \sum_{m=3}^7 k_m \int_{\Gamma_m} u v d\partial\Omega +$$

$$\int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla u) v d\mu + \sigma \int_{\Omega} u v d\mu = \int_{\Omega} f v d\mu$$

Usando a notação de Produto Interno (P.I.), temos:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, v \right)_{L^2(\Omega)} + \alpha (\nabla u | \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \sum_{m=3}^7 k_m \langle u, v \rangle_{L^2(\Gamma_m)} +$$

$$- \sum_{m=1}^2 \langle g, v \rangle_{L^2(\Gamma_m)} + ((\vec{V} \cdot \nabla u), v)_{L^2(\Omega)} + \sigma (u, v)_{L^2(\Omega)} = (f, v)_{L^2(\Omega)} \quad (3.10)$$

A equação (3.10) descreve a formulação variacional para o modelo tridimensional em estudo.

3.5 Discretização do Domínio

Método dos Elementos Finitos (MEF) - Galerkin

O MEF é uma técnica robusta chamada Método dos Elementos Finitos, ela nos ajuda a resolver estes tipos de problemas. Nesta seção conheceremos e aplicaremos o Método dos Elementos Finitos via Galerkin, na aproximação numérica de soluções para Equações Diferenciais Parciais. O MEF foi desenvolvido em 1909 por Walter Ritz (1878-1909), para determinar a solução aproximada de problemas em mecânica dos sólidos deformáveis. Em 1943, Richard Courant (1888-1972) aumentou consideravelmente as possibilidades do método de Ritz introduzindo funções lineares especiais definidas sobre regiões triangulares e aplicou o método para a solução de problemas de torção. Somente em 1960 Ray Clough introduziu o termo elemento finito no artigo “The finite element method in plane stress analysis”. Passando assim a ser utilizado para a simulação baseada em computação, de problemas não estruturais em fluidos, termomecânica e eletromagnetismo. O Método dos Elementos Finitos, via Galerkin, envolve a divisão do domínio da solução num número finito de subdomínios simples (os elementos finitos) e usando conceitos variacionais construir uma aproximante da solução sobre a coleção de elementos finitos CAREY, ODEN (1981).

Para isto, devemos trabalhar com a formulação variacional do problema, em

outras palavras, a idéia principal do método dos elementos finitos consiste em se dividir o domínio (meio contínuo) do problema em sub-regiões de geometria simples (formato triangular, quadrático, cúbico). Os elementos finitos, utilizados na discretização (subdivisão) do domínio do problema são conectados entre si por determinados pontos, denominados nós ou pontos nodais. Ao conjunto de elementos finitos e pontos nodais, usualmente, dá-se o nome de malha de elementos finitos.

3.6 Elementos da Fronteira

Para geometrias bidimensionais, dentre os elementos disponíveis, os triangulares são os mais simples para discretizar a malha e se adaptam bem aos contornos irregulares. Os elementos triangulares compõem as faces dos tetraedros do domínio Ω , gerados pela discretização espacial. Para as fronteiras do domínio temos que os elementos são apenas as faces de alguns tetraedros, isto é, são os triângulos em um plano do espaço.

Na Figura 3.1 temos um elemento arbitrário e de Ω cujos nós são,

$$A = (x_1, y_1), B = (x_2, y_2) \quad e \quad C = (x_3, y_3).$$

A Transformação \mathbf{T} determina a correspondência de um elemento de referência \hat{e} a um triângulo genérico da malha.

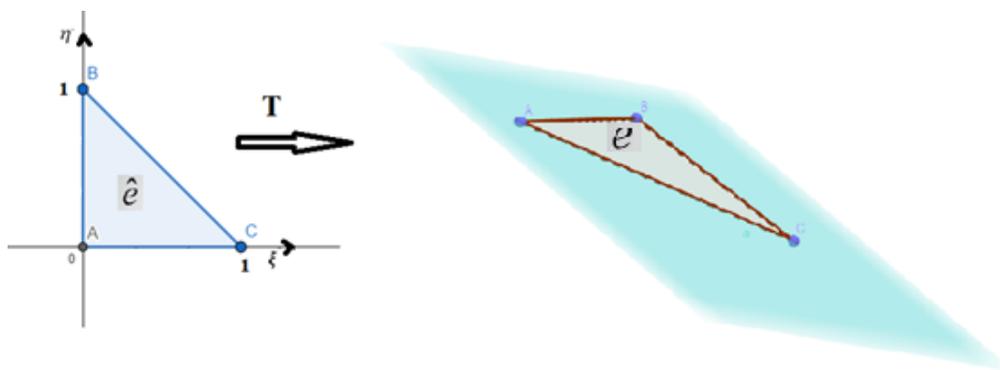


Figura 3.1: Transformação do triângulo e no triângulo \hat{e} pela transformação afim \mathbf{T}

3.7 Domínio tridimensional

Dos diferentes tipos de elementos finitos que podem ser escolhidos para discretizar um determinado domínio tridimensional, em geral os mais adequados são os tetraedros, eles são uma extensão natural e conveniente dos elementos triangulares. Denotemos com $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ uma família finita de NT tetraedros Ω_e , dois a dois disjuntos ou tendo como interseção no máximo uma face, ou uma aresta ou um vértice e tais que :

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{NT} \Omega_e$$

associamos a esta malha o parâmetro h dado por

$$h = \max_e \{diam(\Omega_e)\}$$

e, desta forma, denotamos a família $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ por ζ_h .

Abaixo foi estabelecido uma relação entre um elemento finito qualquer Ω_e , e seu correspondente elemento $\widehat{\Omega}_e$, no sistema referencial de coordenadas, sendo que as funções φ_i que compõem a base B do sub-espço U_h , são tais que:

$$\varphi_i(b_j) = \delta_{ij}, i, j = 1 : NT,$$

dado que δ_{ij} o delta de *Kronecker*, NT o número total de nós e b_j o j -ésimo nó da malha. Define-se o tetraedro com vértices $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 0)$ e $(0, 0, 1)$, como sendo de referência: \widehat{k} .

Assim, as funções φ' restritas a esse elemento de referência, terão a forma:

$$\begin{aligned}\varphi_1(\xi, \eta, \zeta) &= \xi \\ \varphi_2(\xi, \eta, \zeta) &= \eta \\ \varphi_3(\xi, \eta, \zeta) &= 1 - \xi - \eta - \zeta \\ \varphi_4(\xi, \eta, \zeta) &= \zeta\end{aligned}$$

A transformação afim \mathbf{T}_e :

$$\begin{aligned}(1, 0, 0) &\rightarrow (x_1, y_1, z_1) \\ (0, 1, 0) &\rightarrow (x_2, y_2, z_2) \\ (0, 0, 0) &\rightarrow (x_3, y_3, z_3) \\ (0, 0, 1) &\rightarrow (x_4, y_4, z_4)\end{aligned}$$

De fato, esta relação é dada pela transformação afim,

$$\mathbf{T}_e(\xi, \eta, \zeta) = \begin{pmatrix} x_1 - x_3 & x_2 - x_3 & x_4 - x_3 \\ y_1 - y_3 & y_2 - y_3 & y_4 - y_3 \\ z_1 - z_3 & z_2 - z_3 & z_4 - z_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}$$

O método de elementos finitos é implementado aplicando a técnica em que requer que se defina uma transformação afim $T_e : \widehat{\Omega}_e \rightarrow \Omega_e$ que relaciona um elemento referência \widehat{k} , a um elemento genérico k_e . Na Figura 3.2 ilustramos essa transformação T_e .

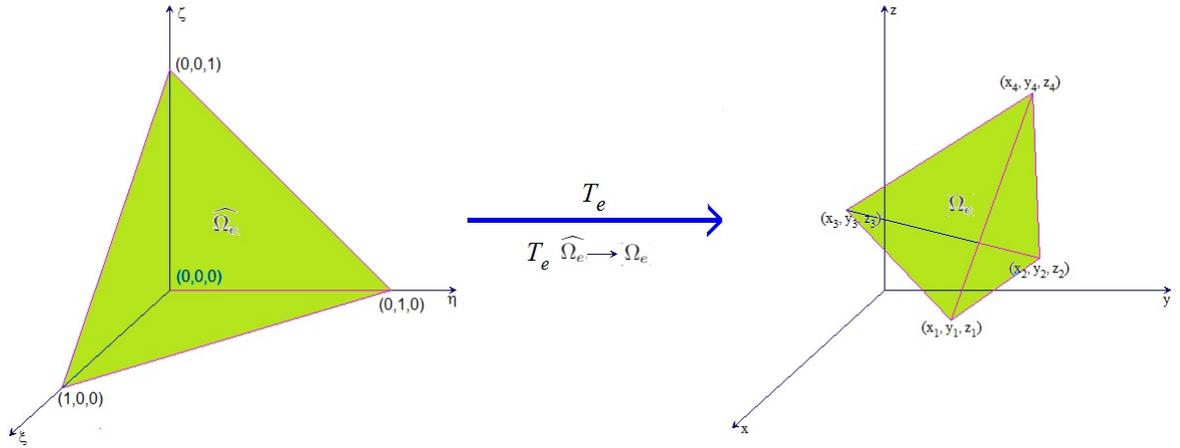


Figura 3.2: Transformação afim \mathbf{T}_e

Dentre os diferentes subespaços finitos que podem ser escolhidos para definir U_h , consideramos o espaço das funções polinomiais de três variáveis de grau menor ou igual a $n \in 1, 2$ definidos em Ω_e , isto é,

$$P_1(k_e) = \{p : \Omega_e \rightarrow \mathbb{R} / p(x, y, z) = a_1x + a_2y + a_3z + a_4, \quad a_1, a_2, a_3, a_4 \in \mathbb{R}\}$$

Definimos os sub-espaços da seguinte maneira:

$$U_{(h)} = \{\varphi \in C^0(\overline{\Omega}) / \varphi|_{\Omega_e} \in P_1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}\}$$

$$V_{(xy)(h)} = \{\varphi \in C^0(\overline{\Omega}) / \varphi|_{\Omega_e} \in P_1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}, \varphi|_{\Gamma_{xy}} = 0\}$$

$$V_{(z)(h)} = \{\varphi \in C^0(\overline{\Omega}) / \varphi|_{\Omega_e} \in P_1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}, \varphi|_{\Gamma_z} = 0\}$$

$$V_{(xy)(h)} = \{\varphi \in C^0(\overline{\Omega}) / \varphi|_{\Omega_e} \in P_1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}\}$$

3.8 Discretização Espacial

Para a discretização espacial da formulação variacional do modelo de (3.13) através do Método dos Elementos Finitos, precisamos do sub-espaço U_h do espaço $H^1(\Omega)$, de dimensão finita, gerado pelas N_h funções testes φ_i , com $i = 1, \dots, N_h$.

A escolha das funções da base $B = \varphi_1(x, y, z), \dots, \varphi_{N_h}(x, y, z)$, que são definidas globalmente sobre os Elementos Finitos, será do tipo linear por partes.

Assim, podemos escrever a concentração como combinação linear das funções base φ_i , isto é,

$$u_h = \sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \varphi_j(x, y, z)$$

e a derivada expressa por,

$$\frac{\partial u_h}{\partial t}(x, y, z; t) = \sum_{j=1}^{N_h} \frac{du_j}{dt} \varphi_j(x, y, z)$$

Substituindo na equação (3.10), isto é, na formulação variacional,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v \right)_{\Omega} + \alpha (\nabla u_h \| \nabla v)_{\Omega} - \sum_{m=1}^2 \langle g, v \rangle_{\Gamma_m} + \sum_{m=3}^7 k_m \langle u_h, v \rangle_{\Gamma_m} + ((\vec{V} \cdot \nabla u_h), v)_{\Omega} \\ + \sigma(u_h, v)_{\Omega} = (f, v)_{\Omega} \end{aligned}$$

Também substituindo as derivadas,

$$\begin{aligned} \left(\sum_{j=1}^{N_h} \frac{du_j}{dt} \varphi_j, v \right)_{\Omega} + \alpha \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j \nabla \varphi_j \| \nabla v \right)_{\Omega} - \sum_{m=1}^2 \left\langle \sum_{j=1}^{N_h} g \varphi_j, v \right\rangle_{\Gamma_m} + \\ + \sum_{m=3}^7 k_m \left\langle \sum_{j=1}^{N_h} u_j \varphi_j, v \right\rangle_{\Gamma_m} + \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j (\vec{V} \cdot \nabla \varphi_j), v \right)_{\Omega} + \sigma \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j \varphi_j, v \right)_{\Omega} = (f, v)_{\Omega} \end{aligned}$$

As soluções $u_j(t)$ não dependem de (x, y, z) , logo podem sair do produto interno.

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_h} \frac{du_j}{dt} (\varphi_j, v)_{\Omega} + \alpha \sum_{j=1}^{N_h} u_j (\nabla \varphi_j \| \nabla v)_{\Omega} - \sum_{m=1}^2 \left\langle \sum_{j=1}^{N_h} g \varphi_j, v \right\rangle_{\Gamma_m} \\ + \sum_{m=3}^7 k_m \sum_{j=1}^{N_h} u_j \langle \varphi_j, v \rangle_{\Gamma_m} + \sum_{j=1}^{N_h} u_j \left((\vec{V} \cdot \nabla \varphi_j), v \right)_{\Omega} + \\ + \sigma \sum_{j=1}^{N_h} u_j (\varphi_j, v)_{\Omega} = (f, v)_{\Omega} \quad \forall v \in U_h \end{aligned} \quad (3.11)$$

Como $v \in U_h$, temos que é suficiente avaliar para os elementos da base de U_h , logo:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{N_h} \frac{du_j}{dt} (\varphi_j, \varphi_i)_\Omega + \alpha \sum_{j=1}^{N_h} u_j (\nabla \varphi_j \| \nabla \varphi_i)_\Omega - \sum_{m=1}^2 \left\langle \sum_{j=1}^{N_h} g \varphi_j, \varphi_i \right\rangle_{\Gamma_m} + \\
& + \sum_{m=3}^7 k_m \sum_{j=1}^{N_h} u_j \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle_{\Gamma_m} + \sum_{j=1}^{N_h} u_j \left((\vec{V} \cdot \nabla \varphi_j), \varphi_i \right)_\Omega + \\
& + \sigma \sum_{j=1}^{N_h} u_j (\varphi_j, \varphi_i)_\Omega = (f, \varphi_i)_\Omega \quad \forall \varphi_i \in B
\end{aligned}$$

Fazendo $u_h = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_{N_h}(t))^T$, podemos escrever a expressão (3.12) sob a forma de um sistema de equações Diferenciais Ordinárias de primeira ordem.

$$M \dot{u}_h(t) + N u_h(t) + W u_h(t) = F$$

sendo,

$$M = (m_{ij})_{n_h \times n_h}, N = (n_{ij})_{n_h \times n_h}, W = (w_{ij})_{n_h \times n_h} \quad e \quad \text{vetor} \quad F = (f_i)_{n_h \times 1}$$

com,

$$\begin{aligned}
m_{ij} &= (\varphi_j, \varphi_i)_\Omega \\
n_{ij} &= \alpha (\nabla \varphi_j \| \nabla \varphi_i)_\Omega + \sigma (\varphi_j, \varphi_i)_\Omega - \sum_{m=1}^2 \langle g \varphi_j, \varphi_i \rangle_{\Gamma_m} + \sum_{m=3}^7 k_m \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle_{\Gamma_m} \\
w_{ij} &= \left((\vec{V} \cdot \nabla \varphi_j), \varphi_i \right)_\Omega \\
f_i &= (f, \varphi_i)_\Omega
\end{aligned}$$

3.9 Discretização Temporal: Crank-Nicolson

Na análise numérica, o método de Crank–Nicolson (MDF) é um método das diferenças finitas usado para resolver numericamente a equação do calor e equações diferenciais parciais similares. É um método de segunda ordem no tempo e no espaço, implícito no tempo e é numericamente estável. Ele foi desenvolvido por John Crank e Phyllis Nicolson na metade do século 20.

Para equações de difusão, pode-se provar que o método de Crank–Nicolson é incondicionalmente estável. Contudo, as soluções aproximadas podem ainda conter oscilações significativas caso a razão entre o passo de tempo e o quadrado do passo de espaço for grande (usualmente maior que 1/2). Por essa razão, sempre que grandes passos de tempo forem tomados, o método menos preciso de euler implícito é frequentemente utilizado, o qual é estável e imune à oscilações. O método de Crank-Nicolson é baseado em diferenças centradas no espaço, e na regra trapezoidal no tempo.

A idéia básica do método de diferenças finitas é substituir as derivadas presentes em uma equação diferencial por expressões algébricas construídas a partir da série de Taylor. Utilizado como método alternativo para a obtenção da solução aproximada de uma equação diferencial parcial, o MDF consiste em transformar em um sistema de equações algébricas para a resolução de uma equação diferencial. Para obter uma solução via diferenças finitas de uma equação diferencial, definida sobre um domínio, é necessário discretizar o domínio, isto é, a solução numérica é obtida em pontos (x_i, t_j) do domínio. A escolha destes pontos irá definir o domínio discretizado, enquanto o conjunto destes pontos irá definir a malha, em nosso caso uma malha retangular com espaçamento h na direção x e com passo de tempo Δt para discretização temporal, isto é, um método implícito alternativo que consiste em implementar as aproximações de diferenças no ponto médio do incremento de tempo.

Para efeitos desta discretização do nosso problema iremos considerar as seguintes aproximações para cada $\mathbf{X}_i \in \Omega$, onde $\mathbf{X}_i = (x_i, y_i, z_i)$ fixo e arbitrário, e $\Omega = \mathbb{R}^3$.

As aproximações temporais consistirão em tomar a aproximação no tempo $n + \frac{1}{2}$ como média de dois tempos subsequentes. Isto é, diferenças centradas em $(t_n + \frac{\Delta t}{2})$. Temos, então, que

$$\frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t}$$

onde, $u_j^{(n+1)} = u_j(t_{n+1})$,

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

e

$$W^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{W^{(n+1)} + W^{(n)}}{2}$$

com u_j^n representando a concentração no j -ésimo nó, para o instante t_n e $u_j^{(n+1)}$ representando a concentração no j -ésimo nó, para o instante t_{n+1} . Para o caso geral, vamos relembrar que u_j denota a concentração na discretização temporal. Então, ficamos com:

$$M \frac{u_h^{(n+1)} - u_h^{(n)}}{\Delta t} + N \frac{u_h^{(n+1)} + u_h^{(n)}}{2} + \frac{W^{(n+1)} + W^{(n)}}{2} \frac{u_h^{(n+1)} + u_h^{(n)}}{2} = F^{(n+\frac{1}{2})}$$

Reescrevendo temos:

$$\left(M + \frac{\Delta t}{2} N + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{W^{n+1} + W^n}{2} \right) \right) u_h^{n+1} =$$

$$\left(M - \frac{\Delta t}{2}N - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{W^{n+1} + W^n}{2}\right)\right) u_h^n + \Delta t F^{(n+\frac{1}{2})}$$

Capítulo 4

Simulações, Resultados e Análises

Neste capítulo, apresentamos alguns resultados numéricos das simulações obtidas a partir do modelo matemático proposto no estudo da dispersão de dióxido de carbono na usina hidrelétrica de Manso e região próxima.

Para obter resultados próximos à realidade, recorreremos aos dados coletados do local, para estimar os valores dos parâmetros necessários para simulação e teste do código numérico para o modelo adotado, dentre eles: o coeficiente de difusão na água e no solo e a velocidade de transporte. Estes parâmetros utilizados foram estimados dentro de espectros plausíveis para o modelo matemático em discussão na simulação de cenários e teste de códigos numéricos desenvolvidos.

A análise da dispersão de poluentes na região do Manso tornou-se um desafio considerando suas dimensões e particularidades, desta forma, buscamos trabalhar com abordagens alinhadas aos estudos teóricos. Também a busca por coeficientes adequados à realidade deste fenômeno ambiental, constituiu em um grande desafio para este trabalho de pesquisa. Isto, decorreu devido a grande dificuldade de se obter dados coletados no local e a escassez de trabalhos realizados que dispusessem de tais dados, então, houve a necessidade de comprá-los da empresa privada de meteorologia a Clima e Tempo. Compramos os dados referente a intensidade e direção do vento, temperatura, precipitação e umidade relativa do período de janeiro de 2016 a dezembro de 2017 na região da usina, da represa e no reservatório.

Os dados de efluxo de CO_2 foram fornecidos pelo pesquisador PINTO-JR, (2007), após contato pessoal. As coletas foram realizadas em solo com característica similares ao da região estudada nesta tese, solos com cobertura vegetal do cerrado, para os anos de 2014 a 2018. As taxas de efluxo de CO_2 dependem da temperatura e umidade, índice de nutriente, respiração da raiz, processos microbióticos, matéria orgânica, aeração do solo, porosidade do solo, disponibilidade de água do solo, produtividade primária líquida (PPL) e o tipo da vegetação existente na área. O efluxo de CO_2 do solo foi medido com o aparelho de absorção de infravermelho que calcula as emissões de CO_2 provenien-

tes do solo, o EGM-1/WMA-2 (PP System, Hitchin Hertz, UK), junto com sua câmara de retenção de CO_2 com $1170cm^3$, cobrindo uma área no solo de $78,5cm^2$. PINTO-JR, (2007).

Para obter os resultados foram utilizadas rotinas em ambiente computacional no Matlab, cuja interface gráfica permite facilidades na análise dos fenômenos tratados. Também dispõe de animações que descrevem o processo evolutivo da dispersão no domínio discretizado, num intervalo de tempo previamente determinado.

A região do reservatório da hidrelétrica de Manso, onde também temos impacto ambiental devido à inundação do solo das regiões próximas, juntamente com o lago, é um local com potencial para emissões acentuadas de CO_2 .

É interessante ressaltar que a não existência de floresta densa na região do Manso, fator que reduziria a atividade convectiva, contribuiria para a acumulação nos baixos níveis da troposfera, próximas a superfície. A troposfera corresponde a 80% do peso atmosférico, tendo uma espessura em torno de $12km$ até $17km$ nos trópicos. Praticamente todos os fenômenos meteorológicos estão confinados a esta camada, na sua base está a Camada Limite Planetária (CLP) ou também conhecida como Camada Limite Atmosférica (CLA). Esta camada é a parte da troposfera que está mais próxima da superfície terrestre, e é diretamente afetada por ela, principalmente através da difusão turbulenta.

As emissões em reservatórios devem variar de forma ampla de acordo com a localização geográfica, com a profundidade, tipo de vegetação, temperatura, dentre outros. A cobertura vegetal deste local é caracterizada como cerrado e em alguns locais apresenta mata de galeria, com árvores de 15 metros de altura com copas não muito densas e raízes pouco profundas. E o solo grande parte coberto por gramíneas ralas. O clima da região apresenta temperatura média entre $27,6^{\circ}C$ a $23^{\circ}C$. De acordo com a classificação de Köppen o clima da região do tipo AW (clima savânico), tropical semi-úmido, com dois períodos distintos: um seco e frio, de maio a outubro e o outro chuvoso e quente, de novembro a abril.

Para a obtenção da simulação na região Ω (paralelepípedo) foram adotadas as seguintes dimensões: a altura (h) de $17.000m$, o comprimento (c) de $65.678m$ e largura (L) de $53.836m$. Na face inferior do paralelepípedo temos o Lago do Manso inserido.

As coordenadas dos nós foram convertidas em UTM - Universal Transversa de Mercator, que utiliza um sistema de coordenadas cartesianas bidimensional para dar localizações na superfície da Terra. É uma representação de posição horizontal, isto é, é utilizada para identificar os locais na Terra independentemente da posição vertical, mas difere do método tradicional de latitude e longitude.

O sistema UTM não é uma simples projeção de mapa. Em vez disso, ele divide a Terra em sessenta zonas, cada uma banda de seis graus de longitude e utiliza uma projeção de mercator transversa secante em cada zona.

Abaixo temos a figura (4.1) que demonstra a discretização em tetraedros do

domínio, e na face inferior as duas regiões Γ_1 e Γ_2 pertencentes ao lado inferior do domínio.

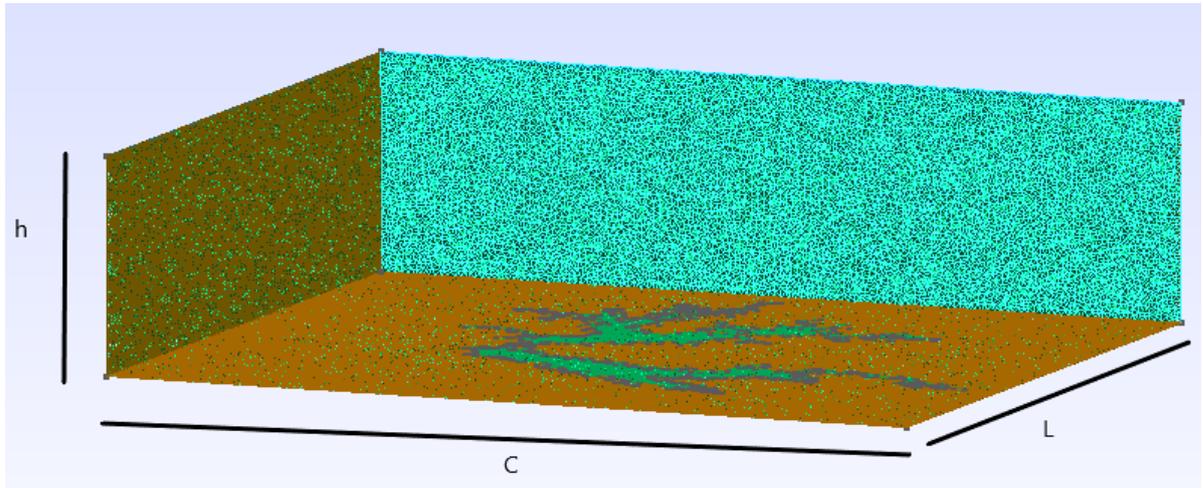


Figura 4.1: Discretização espacial de Ω em tetraedros

Para o domínio Ω temos as fronteiras representadas por Γ_i com $i = 1, 2, \dots, 7$. A Γ_1 representa o lago e Γ_2 é a região retangular excluindo Γ_1 (o lago). Juntas determinam a face inferior de Ω . Conforme vemos na figura 4.2.

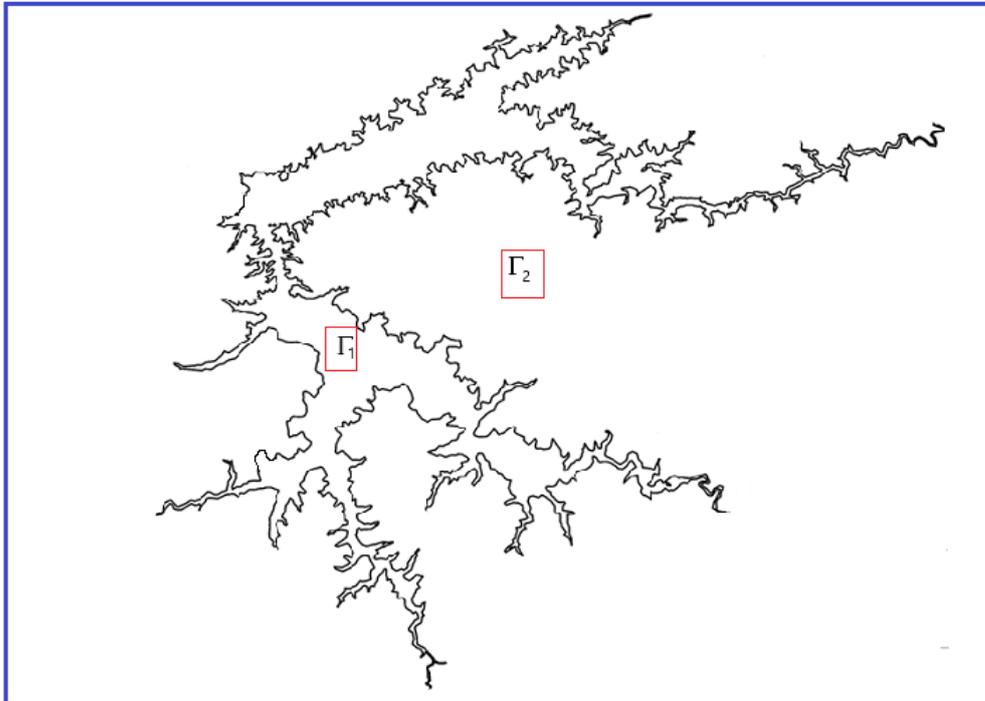


Figura 4.2: Fronteiras Γ_1 e Γ_2

As demais fronteiras Γ_i podem ser observadas na figura 4.3.

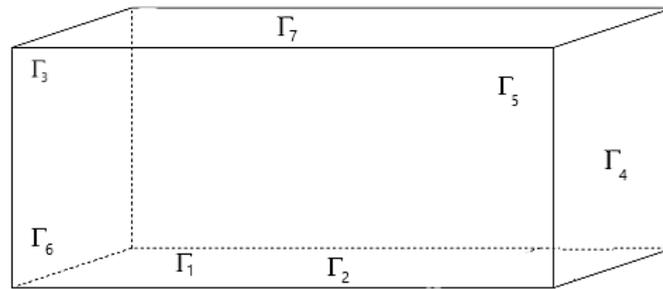


Figura 4.3: Fronteiras do Domínio Ω

A discretização resultou em 417078 de nós, 2451453 elementos tetraedros e 129792 triângulos (elementos da fronteira). Como pode ser visto na figura 4.4 abaixo como uma parte do domínio discretizado.

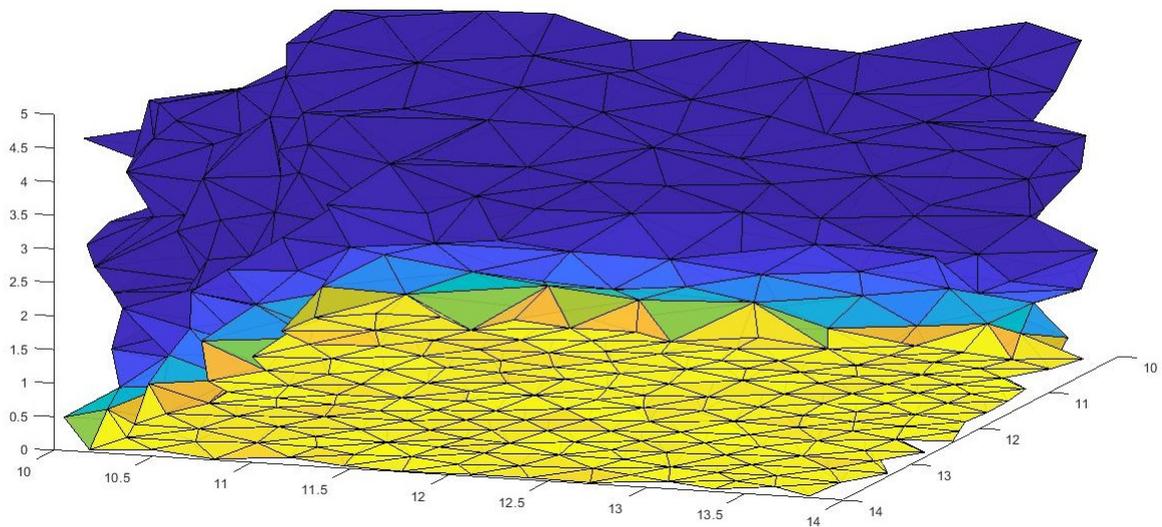


Figura 4.4: Discretização do domínio

4.1 Simulação de Cenários

Para a obtenção da simulação sobre a região foram utilizadas 300 iterações para cada cenário.

4.1.1 Cenário 1

Para determinar alguns dos parâmetros variáveis para o cenário 1, recorreremos aos dados reais do local que foram interpolados. Juntamente com os parâmetros constantes, temos na tabela 4.1 todos os parâmetros necessários para o primeiro cenário.

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados no cenário 1.

Parâmetros	Valores	Unidades
V (vento)	variável	km/d
dt (tempo)	0,05	d (dias)
θ (direção do vento)	...	radianos
σ (degradação)	0	km^2/d
α_1 (difusão ar)	0,01	km^2/d
θ_1 emissão de CO_2 do lago	variável	...
θ_2 emissão de CO_2 do solo	variável	...
k_3	1.0^{-5}	km/d
k_4	1.0^{-5}	km/d
k_5	1.0^{-5}	km/d
k_6	1.0^{-5}	km/d
k_7	1.0^{-4}	km/d
Dióxido de Carbono	...	kg/km^3d

A figura 4.5 representa as iterações iniciais e a evolução da dispersão de dióxido de carbono e podemos observar o gás espalhando na região, com pouca influência do vento.

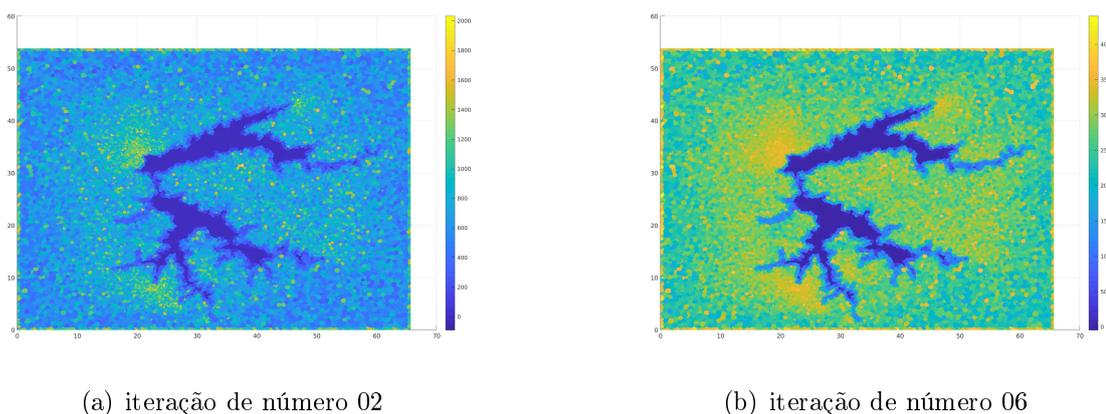
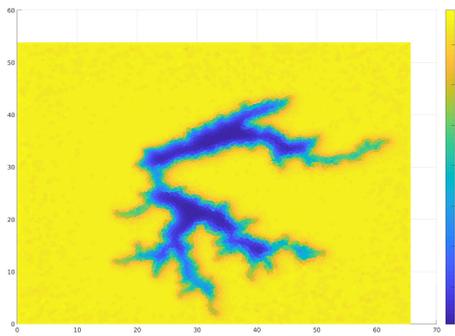


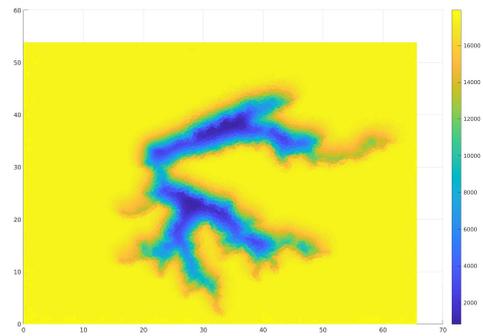
Figura 4.5: Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2 .

A figura 4.6 representa a dispersão do dióxido de carbono para as iterações 130 e 298, apresentando um nível de concentração maior nos locais mais úmido, essas regiões possivelmente tem considerável quantidade de biomassa como fonte presente no solo e na profundidade do lago, pois a decomposição da biomassa alagada é considerada a principal fonte de gases em reservatórios após o alagamento. A menor profundidade possui maior emissão, o que pode ser atribuído a temperatura mais baixa da maior profundidade afetando a pressão e a solubilidade do dióxido de carbono.

Também podemos analisar a dispersão de dióxido de carbono através dos gráficos das figuras 4.7 e 4.8, que mostram o perfil dos blocos das iterações. Indicam um



(a) iteração de número 130



(b) iteração de número 298

Figura 4.6: Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2 .

espalhamento acentuado sobre a região na altura de cerca de $4km$, onde vemos claramente, que o solo com alagamento e locais próximos do lago apresentam maior emissão do gás, pois a concentração de matéria orgânica tais como madeira, galhos e folhas de árvores, podem depositar-se sobre o solo ou nas profundezas do lago, daí possibilita a decomposição e as reações químicas, o que pode alterar a quantidade de emissões nesta região. Observamos que a medida que o tempo evolui, aumentam a dispersão e de forma mais acentuada, gradativamente, próximo ao solo. Porém para os intervalos das larguras entre 15 a 20 quilômetros e outros de 35 a 40 quilômetros pertencentes ao lago apresenta dispersão moderada.

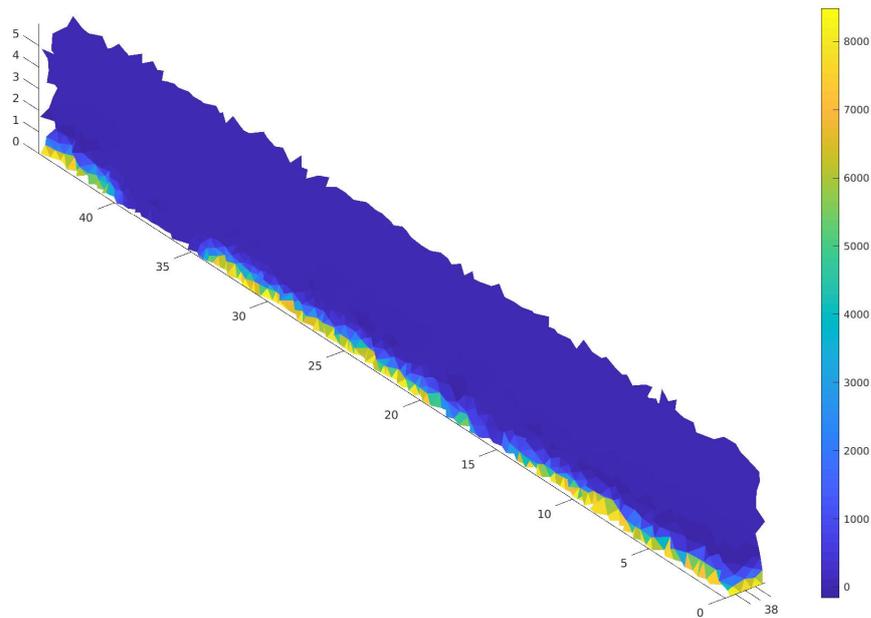
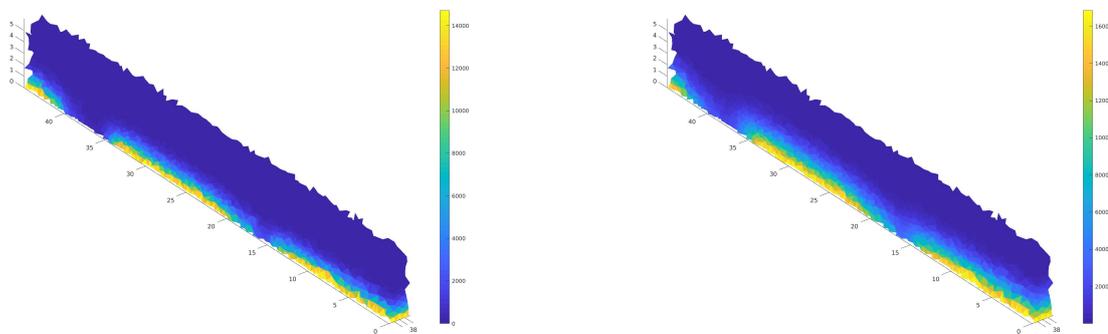


Figura 4.7: Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iteração 40



(a) iteração de número 150

(b) iteração de número 298

Figura 4.8: Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ nas iterações 40s 150 e 298

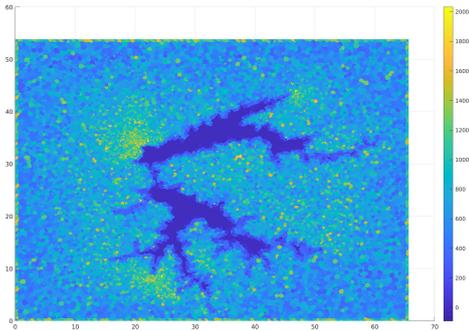
O aumento da concentração desse gás no ar com o avanço das iterações é perceptível, evidenciando o caráter dispersivo que ele sofre ao liberar-se para a atmosfera. Uma outra observação é que o gás permanece sobre a área alagada, com uma concentração mais acentuada nas pequenas áreas alagadas.

4.1.2 Cenário 2

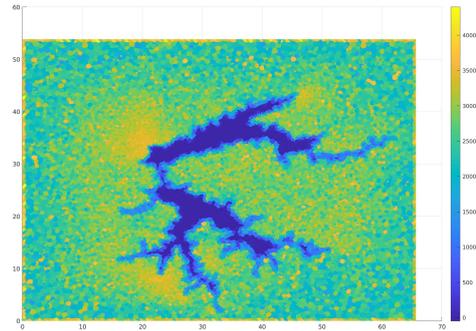
Para o segundo cenário utilizamos os parâmetros descritos na tabela 4.2.

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados no cenário 2.

Parâmetros	Valores	Unidades
V (vento)	variável	km/d
dt (tempo)	0,05	d (dias)
θ (direção do vento)	...	radianos
σ (degradação)	0	km^2/d
α_1 (difusão ar)	0,01	km^2/d
θ_1 emissão de CO_2 do lago	variável	...
θ_2 emissão de CO_2 do solo	variável	...
k_3	0	km/d
k_4	0	km/d
k_5	0	km/d
k_6	0	km/d
k_7	1.0^{-1}	km/d
Dióxido de Carbono	...	kg/km^3d



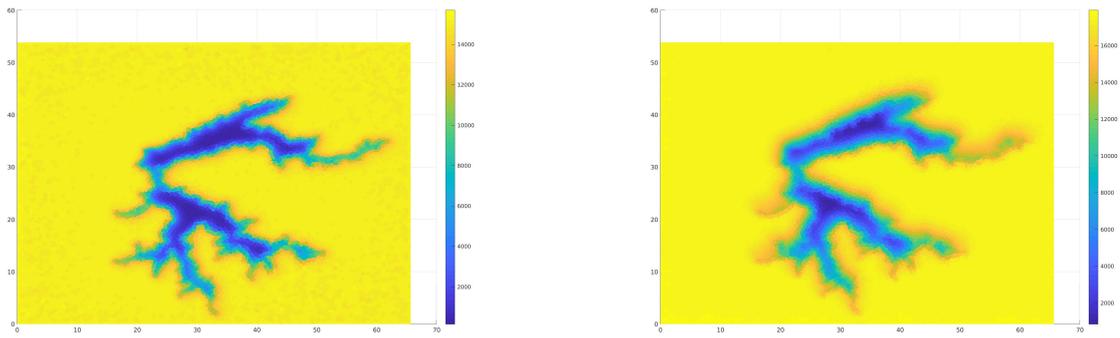
(a) it=02



(b) it=06

Figura 4.9: Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2 .

No cenário 2, o parâmetro k_7 , o coeficiente de difusibilidade no ar, foi aumentado, em outras palavras, temos uma difusibilidade no ar maior que no cenário 1. Novamente encontramos para a superfície não alagada, próxima do lago, temos a dispersão do gás também mais acentuada. Nas figuras 4.9 e 4.10, vemos que próximo do solo há maior concentração do dióxido de carbono, isso acontece porque a emissão que pelo solo é mais elevada do que pela água.



(a) iteração de número 130

(b) iteração de número 300

Figura 4.10: Concentração de CO_2 nas fronteiras Γ_1 e Γ_2 .

Verificamos através das figuras 4.11 e 4.12 que a dispersão do gás ocorre inicialmente nas regiões de pouca umidade e onde o nível de água é baixo, devido possivelmente a fatores como os citados para o cenário 1. Para os mesmos intervalos da largura entre 15 a 20 quilômetros e outros de 35 a 40 quilômetros pertencentes ao lago, a dispersão não é acentuada. Após a inundação, o sistema antes neutro passa a ser emissor de gases de efeito estufa, como o dióxido de carbono.

Para regiões alagadas de baixa profundidade, podem acelerar o processo emissivo, maior quantidade de matéria orgânica, como galhos, árvores e folhas, somado a águas com pouca mobilidade, podem ser responsáveis por uma parcela importante nas emissões.

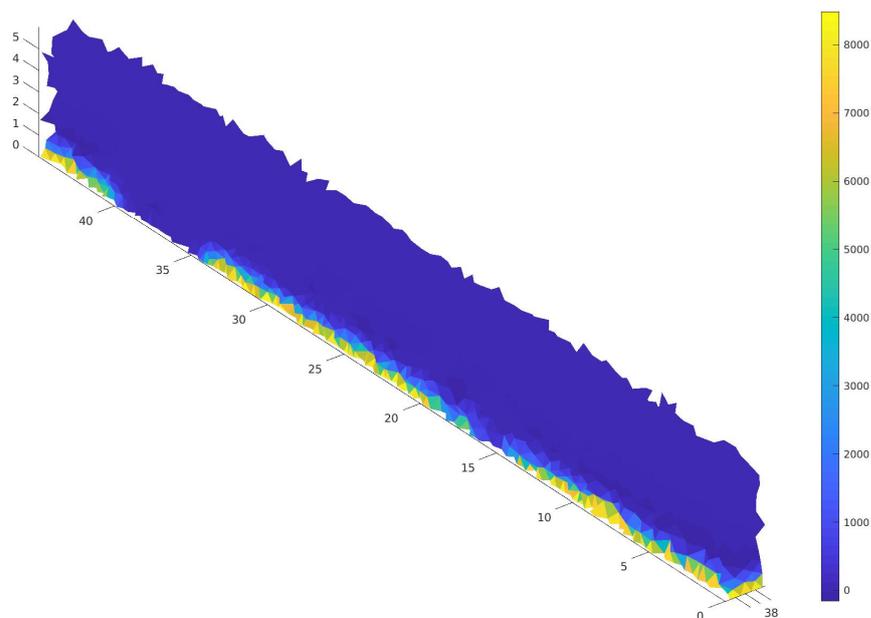


Figura 4.11: Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iteração 40

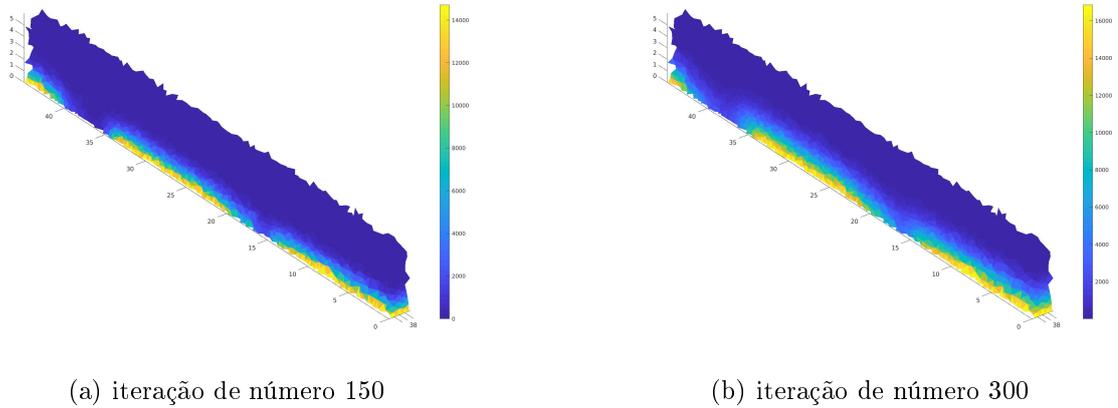


Figura 4.12: Nível da concentração de CO_2 na faixa entre $37km$ a $39km$ na iterações 150 e 300.

Observamos que não houve diferença significativa ao mudarmos o valor de k_7 , possivelmente devido as extensas dimensões das fronteiras adotadas para o modelo.. Temos a representação da dispersão de CO_2 nas figuras 4.11 e 4.12, que torna efetiva sobre toda a região, com espalhamento sobre ela com o aumento das iterações.

Analisando os gráficos, em todos os cenários, podemos interpretar este fenômeno, como caso real, resultante do processo natural do aumento da umidade do solo na região mais próxima do lago, a concentração de dióxido de carbono é maior. Possivelmente essa irregularidade se dá de acordo com o período de cheia ou vazante da parte alagada.

Na região estudada, a dispersão de dióxido de carbono produz uma concentração estabilizada, para todos nós do domínio, conforme mostra a figura 4.13. As curvas retratam o nível de concentração de dióxido de carbono para cada nó da malha escolhido aleatoriamente. As curvas nas cores azul e vermelha representam os nós 1, 1198 do cenário 1 e nas cores amarela e roxa representam os nós 1, 1198 do cenário 2 25100 respectivamente.

Algumas instabilidades numéricas que podem ocorrer em aproximação, é decorrente do termo advectivo quando torna-se preponderante na equação, isso sucede quando as dimensões da malha é maior em um determinado valor ou quando o valor de V (termo advectivo) for muito maior que o de α (coeficiente de difusão) para o caso constante, por exemplo. Daí, o sistema é mal condicionado, pois a matriz associada ao termo advectivo passa a ser assimétrica porém, pode ser contornado com o uso de malhas refinadas.

As simulações obtidas neste trabalho respeitaram as condições de Peclet, e a escolha dos parâmetros de discretização levou em consideração a condição de estabilidade do método, obtendo assim confiabilidade numérica nos resultados.

Notamos que para esses nós, ocorre estabilidade comportamento estacionário da concentração de CO_2 , nos quais possivelmente a fonte para a região atingiu seu valor máximo juntamente com os processos advectivos.

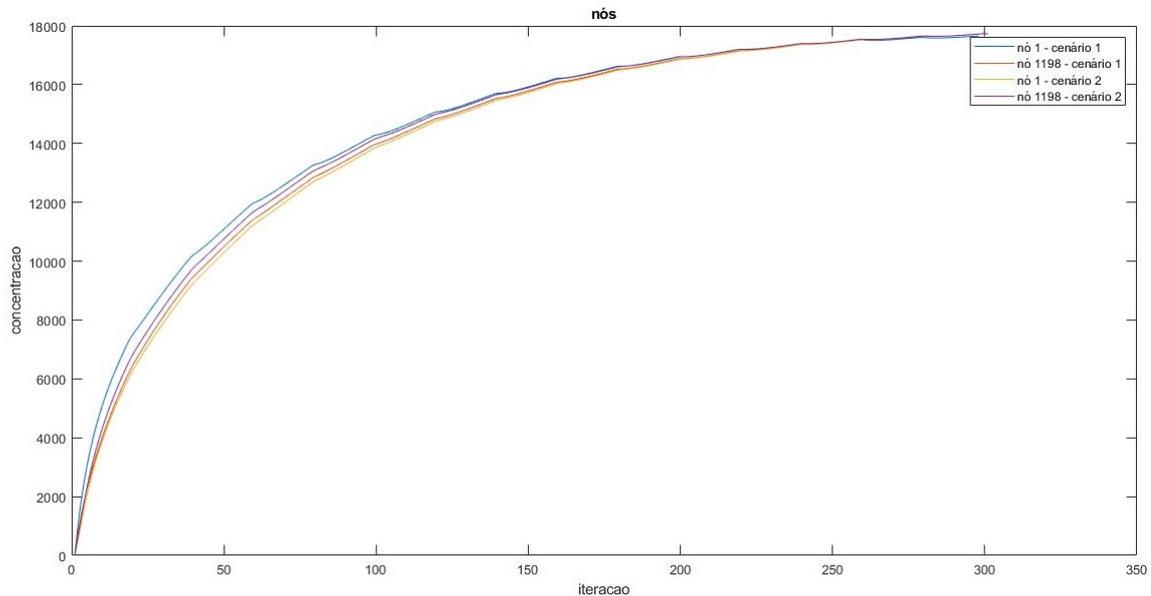


Figura 4.13: Comportamento estacionário da concentração de CO_2 para os nós 1 e 1198

4.2 Conclusão

Este modelo, introduz um aspecto inovador que retrata os cenários expostos da dispersão de gás dióxido de carbono no ar e água, num domínio tridimensional, com alguns parâmetros variáveis no espaço e tempo, com condições de fronteiras adotadas não constantes sobre a região do reservatório da hidrelétrica de Manso e região adjacente, fenômeno este, bastante complexo devido as dificuldades encontradas na dinâmica advectiva, como reações químicas e processos naturais, ação antropogênica, em particular sobre a região. E ainda, deparamos com o problema da escassez de recursos computacionais à altura do volume de dados reais manipulados.

Os cenários apresentados mostraram-se coerentes em relação a quantidade de CO_2 emitida pelo solo e também pela água, com estudos teóricos sobre o processo de emissão desse gás. As regiões analisadas apresentaram resultados nas simulações de acordo com o esperado, sendo observada a nuvem de gás baixa na região, ou seja, a intensidade de gás e a ordem com que cada ponto passa a receber o poluente, tudo isso em concordância com os estudos teóricos e esperado em cada cenário.

Generalizando, podemos dizer que a modelagem, discretização e a simulação

do problema criaram resultados coerentes com todas as hipóteses feitas. Os algoritmos se mostraram robustos, pois pode ser utilizado para variados problemas de dispersão de gases. Para chegar na estabilidade da concentração de CO_2 , foram em média 1500 horas de processamento usadas, em testes com cada diferentes valores para alguns parâmetros de cada cenário. De acordo com a característica principal do trabalho, desde o início relatado, em contruir um modelo de modo mais geral possível, agora dispomos de um algoritmo que pode tratar de vários problemas dessa categoria. Destacamos também neste texto o tratamento teórico original, que nos garante existência e unicidade da solução do problema em sua formulação variacional e também a convergência dos métodos.

Também em termo da computação científica envolvida e que merece ser comentada, de trabalhar com elementos finitos tri-dimensionais em concordância com a descrição do domínio apresentado, suas características geométricas (irregular) e as inerentes dificuldades algorítmicas, código principal independe totalmente desta situação sendo facilmente adaptado mesmo se viermos considerar domínios bem mais irregulares, bastando para isso, introduzir uma nova malha de elementos finitos descritiva da situação de domínio a ser trabalhada. Em outras palavras, a simulação numérica resultante independe, nesse sentido, de especificidades geométricas do domínio.

Considerando como melhoria deste trabalho e sugestão para trabalhos futuros, o problema pode ser modelado sobre a mesma região, com a inserção de mais variáveis, alguns parâmetros experimentais, incorporar uma melhor ordem de aproximação nos elementos finitos ou, ainda, utilizar de outras técnicas que possibilitem aumentar o grau polinomial da aproximação para malha, podendo refinar partes relevantes. Além disso, pode considerar outras fontes do dióxido de carbono na região. A robustez do programa nos anima a procurar parcerias com profissionais de áreas relacionadas ao meio ambiente para o estudo de problemas relacionados a esse.

Referências Bibliográficas

- [1] ALEGRIA, S. A. F. **Dispersão de poluentes em um trecho do rio Coxipó: modelagem e aproximações numéricas**. Dissertação de Mestrado – Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá-MT, 2006.
- [2] BALDOCCHI, D., FALGE, E., GU, L., OLSON, R., HOLLINGER, D., RUNNING, S. **FLUXNET: A new tool to study the temporal and spatial variability of ecosystem scale carbon dioxide, water vapor, and energy flux densities**. Bulletin of the American Meteorological Society, 82, 2415 – 2434, 2001.
- [3] BASSANEZI R. C. ; FERREIRA, J. W. C. **Equações diferenciais com aplicações**. S.Paulo: Harbra, 1988.
- [4] BASSANEZI, R.C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática**. Ed. Contexto, São Paulo/SP, 2002.
- [5] BERNARDES, M. **Poluição de corpos aquáticos de baixa circulação** 1998. Dissertação de mestrado, Imecc - Unicamp, Campinas. SP. 1998.
- [6] BOÇON, F. T. **Modelagem Matemática do escoamento e da dispersão de poluentes na microescala atmosférica**. Tese de Doutorado; Prog. Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina-SC, 1998.
- [7] BRANDÃO, A. A. **Dinâmica temporal do efluxo de CO₂ do solo em área de cerrado no Pantanal Matogrossense**. Dissertação de Mestrado - Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá-MT, 2012.
- [8] CANTÃO, R. F., **Modelagem e Simulação Numérica de Derrames de Óleo no Canal de São Sebastião, SP**. Dissertação de mestrado, Imecc-Unicamp. Campinas. SP. 1998.
- [9] CAREY, G. F.; ODEN, J. T. **Finite Elements: mathematical aspects**. N.York: John Wiley & Sons, 1981. v. 4.
- [10] CASTRO, S. P. E. **Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar**. Tese de Mestrado, IMECC-Unicamp, Campinas/SP. 1993.

- [11] CHILETTO, Eduardo Cairo. **Caracterização climática da região do Lago de Manso: um estudo comparativo com a Área Urbana da Grande Cuiabá.** Dissertação de mestrado. ICET - UFMT. Cuiabá/MT, 2005.
- [12] DINIZ, G. L. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações.** Tese de Doutorado. FEEC-UNICAMP, Campinas-SP, 2003.
- [13] EDELSTEIN-KESHET, L. **Mathematical Models in Biology.** Random-House, New York, 1988.
- [14] FURNAS, Usina Hidrelétrica, http://www.furnas.com.br/hotsites/sistemafurnas/usina_hidr_funciona.asp, acesso 20-dezembro-2018.
- [15] GRAFODI, N. L., **Estudo dos Fluxos Superficiais de Vapor d'água na área da represa do Rio Manso/MT: Modelagem e Simulações.**2006.102p. Tese de Doutorado, UFMT, Cuiabá-MT,2006.
- [16] GUSMÃO, A. M. C, 1989 <http://master.iag.usp.br/pr/ensino/sinotica/aula13/>, acesso 26-dezembro-2019.
- [17] HANSEN, J., M. SATO, R. RUEDY, A. LACIS, and V. OINAS: **Global warming in the twenty-first century: An alternative scenario.** Proc. Natl. Acad. Sci., 97, 9875 – 9880, doi:10.1073/pnas.170278997, 2000.
- [18] HEINRICH, J. C.; MITCHELL, A. R.; ZIENKIEWICZ, O. C. **An upwind finite elements scheme for two-dimensional convective transport equation.** Int. J. Num. Meth. In Eng., v.11, p. 131~143, 1977.
- [19] INFORZATO, N. F. **Dispersão de Poluentes num Sistema ar-água: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional.**2008109f Tese de Doutorado, Imecc - Unicamp, Campinas/SP 2008.
- [20] IÓRIO, R. J.; IÓRIO, V. **Equações diferenciais parciais: Uma introdução.** R.Janeiro: IMPA, 1988.
- [21] JOHANSSON, M., **Turnover of Organic Matter in a Hydroelectric Reservoir – Especially the Carbon Exchange between the Atmosphere and Water.** M.Sc. Thesis, Department of Earth Sciences, Uppsala University, Sweden. 1999
- [22] KRINDGES, A., **Modelagem e simulação computacional de um problema tridimensional de difusão-advecção com uso de Navier-Stokes.** Campinas, SP, 2011.

- [23] LIONS, J. L. **Equations Differentielles Operationelles**. Springer. 1961.
- [24] MARCHUK, G. I., **Mathematical models in environmental problems. Studies in Mathematical and its Applications**, Vol.16. North-Holland, Amsterdam. 1986.
- [25] MEYER, J. F. C. A. e G. L. DINIZ. **Changes of habitat of fish populations: a mathematical model**. *Int. J. Math. Educ. Sci. Technol.* 28(4), 519 – 529. 1997.
- [26] MIKKELSEN, T. **Modelling of pollutant transport in the atmosphere. Atmospheric Physics Division. Wind Energy Department**. Riso National Laboratory. DK-4000 Roskilde, Denmark, p.59, 2003.
- [27] MISTRO, D. C. **O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação**. Tese de mestrado, IMECC-Unicamp, Campinas/SP. 1992.
- [28] MOREIRA, D. ; TIRABASSI, T. **Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental**. *Revista Ambiente & Sociedade*. v.7, n.2, Campinas/SP. 2004.
- [29] ODI. N.L.G. **Estudo dos fluxos superficiais de vapor d'água na área da represa do Rio Manso/MT: modelagem e simulações**. Dissertação (mestrado) - Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá-MT. 2005.
- [30] OKUBO, A., **Difusion and ecological problems: Mathematical models**. Springer, Berlin, 1980.
- [31] OLIVEIRA, R. F. **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. 2003.
- [32] OMETTO, J. C. **Bioclimatologia Vegetal**. São Paulo: Agronômica, 1981.
- [33] PINTO-JR, O. B. **Efluxo de CO₂ do Solo em Floresta de Transição Amazônica Cerrado e em Área de Pastagem**. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal de Mato Grosso. 2007.
- [34] RAICH, J.W.; SCHLESINGER, W.H. **The global carbondioxide flux in soil respiration and its relation ship to vegetation and climate**. *Tellus*, v.44B, n.2, p.81 – 99, b1992.
- [35] ROCHA, C. H. E. A. **Monitoramento in situ do fluxo de dióxido de carbono em reservatórios hidrelétricos no Brasil: o caso do APM Manso**. Tese de doutorado. UFRJ/COPPE, 2009.

- [36] RUDD, J. W.M., HARRIS, R.; KELLY, C.A., HECKY, R.E., **Are Hydroelectric Reservoirs Significant Sources of Greenhouse Gas?**, v. 22, pp 246 – 248.1993.
- [37] SANTOS, E. O. D. **Contribuição ao Estudo do Fluxo de Dióxido de Carbono dentro da Floresta Amazônica**. Dissertação de Mestrado em Ciências- Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1999.
- [38] SANTOS, J. W. M. C., OLIVEIRA, S. M. L. e SOUZA, W. P. S. **Uso do solo e Dinâmica dos Nutrientes nas Águas do Reservatório da Hidrelétrica de Manso no Estado de Mato Grosso, Brasil Central**, 2013, consultado em 25 janeiro de 2018. URL:<http://journals.openedition.org/confins/8433>; DOI: 10.4000/confins.8433.
- [39] SEINFELD, J. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. N. York: John Wiley & Sons. 1986.
- [40] SEKIMURA, F.P.M. **Dispersão do metano na baixa atmosfera do pantanal**. Tese (Doutorado) - Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá-MT. 2018.
- [41] UNESCO/IHA,, **The UNESCO/IHA Measurement specification guidance for evaluating the GHG status of man-made freshwater reservoirs**. UNESCO/IHA greenhouse gas(GHG) research project.2009
- [42] VAREJÃO, M. A. **Meteorologia e Climatologia**. Recife, 2006.
- [43] VOURLITIS,G.L.; PRIANTE FILHO N.;HAYASHI, M.M.S.; NOGUEIRA, J.S.; RAITER,F.; HOEGEL, W.; CAMPELO, JR.J.H. **Effect sof Meteorological Variationsonthe CO₂ Exchange of a Brazilian Transitional Tropical Forest. Ecological Applications**, v.14, p.89 – 100, 2004.
- [44] WOLMUTH, L., **Modelagem e simulações do comportamento evolutivo de poluentes em corpos aquáticos de grande extensão: o caso da represa do rio Manso**. Dissertação de mestrado, Imecc-Unicamp. Campinas (2009).