

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

**DISPERSÃO DO METANO NA BAIXA ATMOSFERA DO
PANTANAL MATOGROSSENSE**

FERNANDA PALHARES MARINGOLO SEKIMURA

Orientador: Prof.Dr. Geraldo Lúcio Diniz

Cuiabá-MT
Dezembro de 2018

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

**DISPERSÃO DO METANO NA BAIXA ATMOSFERA DO PANTANAL
MATOGROSSENSE**

FERNANDA PALHARES MARINGOLO SEKIMURA

**Tese apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física Ambien-
tal como parte dos requisitos para
a obtenção do título de Doutor em
Física Ambiental.**

Orientador: Prof. Dr. Geraldo Lúcio Diniz.

Cuiabá-MT
Dezembro de 2018

Dados Internacionais de Catalogação na Fonte.

S463d Sekimura, Fernanda Palhares Maringolo.
Dispersão do metano na baixa atmosfera do pantanal matogrossense / Fernanda Palhares Maringolo Sekimura. -- 2018
xiii, 47 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. método dos elementos finitos. 2. equação difusão-advecção. 3. gases de efeito estufa. 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: DISPERSÃO DO METANO NA BAIXA ATMOSFERA DO
PANTANAL MATO-GROSSENSE**

AUTORA: FERNANDA PALHARES MARINGOLO SEKIMURA

Tese de Doutorado defendida e aprovada em 03 de dezembro de 2018, pela
comissão julgadora:



Prof. Dr. Geraldo Lúcio Diniz
Orientador

Instituto de Ciências Exatas e da Terra - UFMT



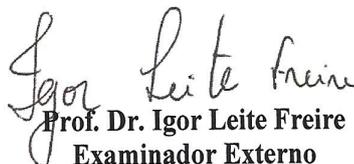
Prof. Dr. Aldi Nestor de Souza
Examinador Interno

Instituto de Ciências Exatas e da Terra - UFMT



Prof. Dr. Sérgio Roberto de Paulo
Examinador Interno

Instituto de Física /UFMT



Prof. Dr. Igor Leite Freire
Examinador Externo

Centro de Matemática, Computação e
Cognição/UFABC



Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer
Examinador Externo

Instituto de Matemática Estatística e Ciência da Computação – UNICAMP

A meu filho Leonardo.

Agradecimentos

Como agradecer por este trabalho em algumas linhas? Tarefa difícil!

Vou começar pelo incentivo que recebi dos organizadores do CNMAC - Congresso Nacional de Matemática Aplicada, em 2013, quando os trabalhos em Biomatemática despertaram minha admiração e decidi me candidatar a este programa. Obrigada!

Pelo incentivo também da minha família, que sempre, mesmo diante de muitas dificuldades, valoriza a ciência e a educação. Obrigada!

Aos professores do PPGFA, onde encontrei mais do que grandes mestres, verdadeiros incentivadores. Obrigada!

Aos colegas do Departamento de Matemática, que me permitiram tempo para dedicação exclusiva ao trabalho, em especial aos que demonstraram carinho e alegria por cada conquista neste tempo aqui dedicado. Obrigada!

Professores da banca examinadora, que se dedicaram para que este trabalho se efetivasse. Obrigada!

Professor Geraldo, embora esteja inserido nos parágrafos acima, devo destacar especialmente pela dedicação e confiança que depositou em ser meu orientador. Obrigada!

Pelo incentivo à ciência e apoio financeiro da FAPEMAT. Obrigada!

Por fim, Mario, o grande técnico da minha vida, o maestro que sempre me orienta a manter o foco no objetivo. E Leonardo, Ah! Leonardo. Aos dois, muito obrigada!

*"O amor de mãe é o combustível
que capacita um ser humano comum
a fazer o impossível."
(Marion C. Garretty)*

Resumo

SEKIMURA, F.P.M. **Dispersão do metano na baixa atmosfera do pantanal matogrossense**. Cuiabá, MT. 2018. 47f. Tese (Doutorado) – Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso.

Apesar da ampla literatura encontrada sobre o Pantanal, não há estudos do problema da dispersão do metano por meio de modelos matemáticos e simulações computacionais. Neste trabalho é proposto um modelo baseado em uma equação geral de transporte, equação difusão-advecção, com o objetivo de simular cenários da dispersão de metano próximo à superfície na região da Baía de Chacororé, no pantanal matogrossense. A solução é dada a partir da aproximação numérica com o uso do método dos elementos finitos (MEF) para as aproximações espaciais e o método de Crank-Nicolson para as aproximações temporais. No domínio foi utilizada uma malha não estruturada. E finalmente, um código numérico para simulações computacionais é apresentado, bem como alguns resultados numéricos usados para a produção de saídas gráficas qualitativamente adequadas para se avaliarem cenários possíveis de impacto.

Palavras-chave: Método dos elementos finitos; equação difusão advecção; gases de efeito estufa.

Abstract

SEKIMURA, F.P.M. **Methane dispersion in low atmosphere of the Pantanal of Matogrosso**. Cuiaba, MT. 2018. 47f. Thesis (Doctorate) – Physics Institute, Federal University at Mato Grosso State.

Despite the wide literature on the Pantanal, there are no studies of the problem of methane dispersion by mathematical models and computational simulations. This work proposes a model based on a general equation of transport, a diffusion-advection equation, with the objective of simulating scenarios of the dispersion of methane near the water surface in the region of Chacorore Bay, in the Pantanal of Matogrosso. The solution is given by numerical approximation using the finite element method (FEM) for spatial approximations and the Crank-Nicolson method for temporal approximations. In the domain we use a non structured mesh. Finally, a numerical code for computational simulations is presented, as well as some numerical results used to produce qualitatively suitable graphical outputs to evaluate possible scenarios of impact.

Keywords: Finite element method; diffusion-advection; greenhouse gases.

Conteúdo

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de figuras	xii
Lista de tabelas	xiii
Lista de símbolos	xiii
Introdução	1
1 Revisão Bibliográfica	4
1.1 Efeito estufa e aquecimento global	4
1.2 Metano (CH ₄)	6
1.3 Área de estudo: O Pantanal	9
1.3.1 As baías Sinhá Mariana e Chacororé	10
1.4 Modelos Matemáticos	11
2 A Modelagem Clássica do Problema	14
3 Formulação Variacional e Discretização	18
3.1 Formulação Variacional	18
3.2 Discretização espacial: Galerkin Standard	20

3.3	Discretização temporal: Crank-Nicolson	24
3.4	Estudo da estabilidade	24
4	Resultados e Discussão	26
4.1	Parâmetros	26
4.2	Cenário 1	27
4.3	Cenário 2	31
4.4	Cenário 3	32
4.5	Cenário 4	34
4.6	Cenário 5	36
4.7	Cenário 6	38
5	Cosiderações Finais	41
	Referências Bibliográficas	42
A	Apêndices	48
A.1	Conceitos e definições	48
A.2	Cálculos dos Produtos Internos	49
B	Códigos Computacionais	53

Lista de Figuras

1.1	Localização da área de estudo: Pantanal Matogrossense, Brasil.	11
2.1	Área de estudo e domínio Ω	17
3.1	Discretização do domínio Ω	22
3.2	Transformação T	23
4.1	Distribuição espacial da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,52 minutos.	28
4.2	Localização dos nós escolhidos	29
4.3	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	30
4.4	Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 51,11 minutos.	31
4.5	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	32
4.6	Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,62 minutos.	33
4.7	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	34
4.8	Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,42 minutos.	35
4.9	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	36
4.10	Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,56 minutos.	37
4.11	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	38

4.12	Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,36 minutos.	39
4.13	Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω	40

Lista de Tabelas

4.1	Parâmetros usados nas simulações.	27
-----	---	----

Lista de símbolos

Γ	Fronteira do domínio
σ	Coefficiente de decaimento
Σ	Somatório
α	Coefficiente de difusibilidade
Δ	Operador Laplaciano
η	Vetor normal
Ω	Domínio
H^1	Espaço de Sobolev de ordem 1
ν	Função pertencente ao espaço H^1
\mathcal{L}^2	Espaço das funções de quadrado integráveis

Introdução

A modelagem matemática tenta reproduzir as características relevantes dos fenômenos ambientais para tratamento de uma determinada questão específica. Há várias metodologias e modelos que descrevem os fenômenos da natureza e, geralmente, os modelos se dão através de equações diferenciais parciais (EDP's). 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, a fim de tentar explicar as mudanças nas variáveis de interesse.

A construção de um modelo consiste na identificação dos fatores que influenciam de maneira relevante o problema, de acordo com as informações disponíveis e os propósitos do projeto. O próximo passo é encontrar uma aproximação numérica do modelo, tarefa atribuída aos métodos numéricos. Nesta etapa as equações são discretizadas utilizando um determinado método numérico. Os métodos tradicionais disponíveis 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.

O transporte de poluentes na atmosfera é normalmente avaliado através de modelos matemáticos. Os modelos matemáticos que determinam as propriedades da atmosfera e o seu efeito sobre o(s) poluente(s) são denominados de modelos de dispersão, e têm se mostrado bastante eficientes para o estudo de perturbações globais ou mesmo de ecossistemas em particular.

O Pantanal ocupa uma área de 150.355 km^2 e pode ser considerado como a maior

área alagada da América do Sul. O alagamento na região apresenta claramente um ciclo sazonal, com máximo após dezembro. O Pantanal com sua área alagada sazonalmente, grande período anual de alagamento e disponibilidade de matéria orgânica, tem um ambiente favorável à presença de organismos metanogênicos que o torna potencialmente uma importante fonte regional de metano que é um dos principais gases que participam do efeito estufa.

O metano é um dos principais gases que contribuem para o aumento do efeito estufa natural, aproximadamente 20% do efeito total observado. Sua produção primária tem origem da decomposição de matéria orgânica por bactérias em meios anaeróbios, como áreas alagadas, aterros sanitários, trato digestivo de ruminantes e outros animais. Parte do metano atmosférico tem origem na utilização de combustíveis fósseis e na queima de biomassa.

O Brasil está entre os maiores emissores mundiais de gases de efeito estufa – GEE ao lado da Indonésia e Rússia e atrás dos Estados Unidos, China e União Europeia. Atualmente, as emissões brasileiras representam cerca de 5% das emissões globais. A estimativa das emissões do Brasil é de 1,25 bilhão de tonelada de carbono equivalente (ano de 2010). Cerca de 60% destas é resultado de atividades de uso do solo como o desmatamento e as queimadas, sendo que 67% destes ocorrem na Amazônia e 22%, no Cerrado.

O objetivo do presente trabalho é fazer um estudo sobre como o gás metano se dispersa na baixa atmosfera da região do pantanal propondo um modelo que represente o fenômeno, baseado na equação difusão-advecção em um domínio bidimensional, e gerar um código numérico que permita fazer simulações computacionais para análise de cenários. Para tal fim, serão necessárias a obtenção da formulação variacional da equação do modelo assim como as discretizações desta e do domínio.

No primeiro capítulo é apresentada a questão de emissões de gases de efeito estufa (GEE) em áreas alagadas. O capítulo 2 apresenta a modelagem matemática na sua formulação clássica, com as respectivas condições de contorno e condição inicial. No capítulo 3, é obtida a formulação variacional do problema, bem como as discretizações

espaciais e temporais. No capítulo 4 são apresentados os resultados e discussões das simulações. O capítulo 6 apresenta as conclusões sobre o trabalho e propostas para trabalhos futuros.

Capítulo 1

Revisão Bibliográfica

1.1 Efeito estufa e aquecimento global

A intervenção humana no clima da Terra ocorre há milhares de anos, entretanto, somente nos dois últimos séculos estas intervenções passaram a ser comparáveis ao ciclo natural do carbono (MALHI, *et al.*, 2002), acelerando o processo natural de aquecimento global e do efeito estufa. Um crescimento acentuado da população mundial vem sendo observado, principalmente, neste último século, acarretando uma industrialização em grande escala, expansão das áreas urbanas, aumento das atividades agrícolas e pecuárias e, principalmente, o aumento da queima de combustíveis fósseis, como o petróleo, o gás natural, o carvão mineral e a biomassa, que vem afetando significativamente o clima global (BASSO, 2014).

O efeito estufa deve-se à existência de gases na atmosfera, como o dióxido de carbono (CO_2), o metano (CH_4), o óxido nitroso (N_2O), o vapor d'água (H_2O), o ozônio (O_3) entre outros, os quais absorvem energia na forma de calor, que é emitido pela crosta terrestre, impedindo, assim, que a radiação da superfície retorne ao espaço, mantendo a troposfera aquecida e fazendo com que a temperatura média global aumente (MARANI, 2007).

Segundo Castro *et al.* (2002), a caracterização do efeito estufa natural relaciona-se com a constatação de que os gases da atmosfera terrestre comportam-se como gigan-

tescas campânulas que bloqueiam as radiações calóricas emitidas pela Terra, retendo parte do calor solar. Esse efeito estufa produz uma elevação média de trinta graus centígrados na temperatura da troposfera global, que atinge a média de 16°C.

Nestas condições, o efeito estufa natural, ao manter grandes porções de água da hidrosfera em estado líquido, tornou possível o desenvolvimento da vida na Terra. Uma ameaça de desastre misto, como afirma o autor, relaciona-se com uma hipótese de intensificação do efeito estufa, em decorrência da crescente liberação dos chamados gases de estufa, como o metano, o dióxido e carbono e o dióxido de enxofre, como consequência de atividades humanas, e que estariam promovendo uma tendência para o aquecimento global (CASTRO *et al.* 2002).

O IPCC - Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas, em seu quinto relatório, desenvolveu quatro cenários de aumento da temperatura terrestre. No primeiro cenário, o mais otimista, ele variaria entre 0,3 e 1,7 graus Celsius até 2100, o que causaria a elevação de 26 até 55 cm do nível do mar. No pior cenário, o aumento seria entre 2,6 e 4,8 graus Celsius, com elevação de até 82 cm do nível dos oceanos. Porém, é importante observar que esse aumento da temperatura não será uniforme pela superfície do planeta: algumas regiões esquentarão mais que outras. E, ainda assim, poderá ser observado resfriamento de algumas poucas áreas da Terra (ROCHA *et al.*, 2014).

Apesar de também existirem fatores naturais (vulcões, tempestades solares, meteoritos, ciclos de Milancovich, ciclos de variações da órbita da Terra em torno do Sol, etc.) que imprevisivelmente podem causar mudanças no clima da Terra, o cumprimento pelos diferentes países das medidas previstas nos protocolos da Convenção-Quadro da ONU é fundamental para minimizar previsíveis mudanças do clima e para que a humanidade consiga um desenvolvimento sustentável que garanta a continuidade da vida em nosso planeta (TOLENTINO & ROCHA-FILHO, 1998).

Vários pesquisadores tem alertado que o Pantanal pode ser drasticamente afetado por mudanças climáticas. O bioma abriga mais de mil espécies de animais e duas mil espécies de plantas. Como efeito das mudanças, a estiagem prolongada pode afetar

ciclo das águas. Esse processo que já está transcorrendo ainda pode ser acelerado em razão de uma outra situação, esta de ação ainda mais direta do homem, a da instalação de pequenas centrais hidrelétricas, as chamadas PCHs, ao longo da bacia pantaneira (WWF BRASIL).

1.2 Metano (CH_4)

De acordo com o Programa ProClima da CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (2009), o metano é um dos principais gases que contribuem para o aumento do efeito estufa, cerca de 15 a 20%. Este gás é componente primário do gás natural, também produzido por bactérias no aparelho digestivo do gado, aterros sanitários, plantações de arroz inundadas, mineração e queima de biomassa.

Segundo Basso (2014), devido à sua concentração na atmosfera e ao seu potencial de aquecimento global, o CH_4 é considerado, entre os gases primários, o segundo gás de efeito estufa mais importante. O seu Potencial de Aquecimento Global, que é a capacidade de absorção e redistribuição de energia térmica emitida pela Terra em função da vida média do gás, é 25 vezes maior que o CO_2 em um cenário de 100 anos e seu tempo de vida atmosférico é estimado em 12 anos.

O metano é produzido a partir de complexas reações bioquímicas da decomposição anaeróbia de materiais orgânicos. Este processo ocorre em larga escala onde acontece a decomposição de plantas submersas em água, por exemplo em pântanos e brejos, e em terras úmidas destinadas à rizicultura. Terras alagadas são a maior fonte natural das emissões de metano, bem como grandes lagos de hidrelétricas, especialmente quando a madeira não é previamente removida da área a ser inundada (ALVALA, *et al.*, 1999).

O trabalho de Santos (2006), que se propôs estudar os gases de efeito estufa em ambientes naturais e reservatórios hidrelétricos, para uma ampla quantidade de dados de fluxo de dióxido de carbono e metano, em diversas partes do mundo, aponta que rios e lagos naturais são fontes significativas de CO_2 , enquanto que áreas de turfa,

áreas alagadas e savanas são grandes emissoras de CH_4 . Ainda, confirmou também que o comportamento de reservatórios hidrelétricos é similar aos ecossistemas naturais alagados em relação à emissão média de fluxos de CH_4 e CO_2 .

Segundo o Relatório do IPCC (Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas) de 2007, a concentração de metano na atmosfera global mais que dobrou em relação à época pré-industrial, aumentando de 715 ppb (partes por bilhão) para 1732 ppb no início da década de 1990. Presume-se que o aumento da concentração de metano na atmosfera seja em grande parte antropogênico, por atividades como o aumento da produção de alimentos, o uso intenso de combustíveis fósseis e o desflorestamento (BERTO NETO, 2009).

Embora tenha sido detectada na atmosfera em 1948, a sua importância para clima foi recentemente revelada por três descobertas principais. A primeira, por Wei-Chyung Wang e seus colegas da GISS NASA (Goddard Institute for Space Studies), em 1976, foi que o metano na atmosfera era realmente um gás de efeito estufa significativo - ele absorve algumas frequências de radiação infravermelha (emitida a partir da superfície da Terra), que de outra forma iriam diretamente para espaço.

A segunda descoberta resultou da análise de núcleos de gelo da Groelândia e Antártida retirados através de uma profunda perfuração na camada de gelo. Os investigadores foram capazes de isolar os gases aprisionados dentro de pequenas bolhas no gelo. Os gases estufas, CO_2 e CH_4 , dentro dessas bolhas revelou que, desde o período pré-industrial, as concentrações de CO_2 e CH_4 tem aumentado rapidamente. Na verdade, as concentrações de CH_4 mais do que duplicou nos últimos 150 anos, e a contribuição para o efeito de estufa é quase a metade do que devido ao aumento de CO_2 durante o mesmo período.

A terceira descoberta foi uma investigação excepcional por Jeff Severinghaus da Scripps Institution of Oceanography e Ed Brook, da Universidade do Estado de Washington. Ele convincentemente mostrou (usando alguma técnica em geoquímica envolvendo os isótopos de nitrogênio que reagem a mudanças rápidas das temperaturas da superfície) que o metano aumenta rapidamente em um clima mais quente

com um pequeno atraso em relação à temperatura. Portanto, não só o metano afeta o clima através do efeito estufa, como também pode ser afetado pelo próprio clima (SCHIMIDT, 2004).

Embora a maioria das fontes e sumidouros de CH_4 tenham sido identificadas, suas contribuições em relação aos níveis de CH_4 na atmosfera são incertas. Como tal, os fatores responsáveis pela estabilização dos níveis atmosféricos de CH_4 no início de 2000, e o aumento após 2006, permanecem obscuros (KIRSCHKE, *et al.*, 2013).

Os autores construíram um balanço global de CH_4 para as últimas três décadas, onde constataram que a diferença entre o total emitido e o total consumido vem diminuindo ao longo do tempo, passando de 30 teragramas de CH_4 por ano entre 1980 e 1989 para 8 teragramas de CH_4 por ano entre 2000 e 2009. Ainda, mostram que ao longo das últimas três décadas, as variações nas emissões de áreas alagadas tem dominado, de ano pra ano, a variabilidade das emissões de superfície, e que as áreas alagadas contribuem com a maior parte das emissões naturais (cerca de 32% do total emitido).

O projeto Pecus Pantanal (Embrapa Pantanal) está medindo as emissões de metano entérico (produzidos pela fermentação entérica dos bovinos, que é um processo natural da digestão dos ruminantes) e as emissões de metano que vêm do solo, das áreas alagáveis. Essa emissão do solo é um processo que também é natural, comum em regiões de áreas alagáveis. O gás é produzido em solos encharcados, com pouco oxigênio. Investigam ainda, se esses solos absorvem o metano quando secam.

Com essas investigações pretendem produzir dados reais, que sejam medidos e não estimados a partir de parâmetros definidos internacionalmente e, assim, analisar a contribuição efetiva da pecuária no Pantanal para a emissão de gases do efeito estufa e, conseqüentemente, para o aquecimento global. Também pretendem verificar se existem ações que podem mitigar essa emissão ou compensá-la.

1.3 Área de estudo: O Pantanal

Localizado no centro da América do Sul, o bioma Pantanal é considerado uma das maiores extensões úmidas contínuas do planeta. Sua área é de 150.355km², ocupando assim 1,76% da área total do território brasileiro, com 65% de seu território no estado de Mato Grosso do Sul e 35% no Mato Grosso. Este bioma continental é considerado o de menor extensão territorial no Brasil, entretanto este dado em nada desmerece a exuberante riqueza que o referente bioma abriga. Em seu espaço territorial o bioma, que é uma planície aluvial, é influenciado por rios que drenam a bacia do Alto Paraguai. Apesar de sua beleza natural exuberante o bioma vem sendo muito impactado pela ação humana, principalmente pela atividade agropecuária, especialmente nas áreas de planalto adjacentes do bioma. De acordo com o Programa de Monitoramento dos Biomas Brasileiros por Satélite – PMDBBS, realizado com imagens de satélite de 2009, o bioma Pantanal mantém 83,07% de sua cobertura vegetal nativa. Com relação à área antrópica, nota-se que a agricultura é inexpressiva no bioma (0,26%), dando lugar à pecuária extensiva em pastagens plantadas, que equivalem a 10,92% da área do bioma e ocupam 94,68% da área antrópica (BRASIL, 2016).

O bioma apresenta uma dinâmica peculiar, sendo considerado pela Organização das Nações Unidas para a Educação, a Ciência e a Cultura (UNESCO) como Patrimônio Natural Mundial e Reserva da Biosfera e pela Constituição Brasileira de 1988 Patrimônio Nacional.

No Mato Grosso ocorrem três sub-regiões do Pantanal: Cáceres, Barão de Melgaço e Poconé. Os critérios adotados na delimitação foram os aspectos relacionados a inundação, relevo, solo e vegetação (SILVA e ABDON, 1998).

A superfície de inundação na região varia de 11.000 a 110.000km², dependendo do ano, com uma média histórica de 53.000km². Dessa forma, extensas áreas podem permanecer submersas por inundação, devido ao extravasamento dos rios ou alagamento resultante das chuvas locais e da elevação do nível do lençol freático, por até 8 meses. As estações de chuva e seca são bem definidas. O volume de chuvas no verão é

muito maior do que no inverno. Portanto, o verão é uma estação chuvosa no Pantanal, enquanto o inverno é seco. O índice pluviométrico do Pantanal é de 1.110 mm por ano. A umidade relativa do ar fica em torno de 50% no inverno e 75% no verão (BRASIL, 1974).

A temperatura média anual é de 22,6°C, em julho o clima torna-se mais frio, com temperatura média de 19,1°C (mínimas de 13°C e máximas de 26°C) e em Janeiro é quente, com a temperatura média de 26,4°C (mínimas de 22°C e máximas de 33°C), segundo IBGE, 2016.

1.3.1 As baías Sinhá Mariana e Chacororé

Para o presente estudo, foi escolhida a subregião de Barão de Melgaço, que é uma cidade situada à margem esquerda do Rio Cuiabá, a 140 km da Capital e abriga em sua região belas lagoas e baías, como a de Sinhá Mariana e a Chacororé, esta considerada uma das maiores baías do mundo. Na época da cheia, 98% do Território de Barão de Melgaço, fica alagado, com isto a cidade se torna uma grande e maravilhosa ilha turística (<http://www.guiapantanal.com/pantanal/barao-do-melgaco/> acessado em 17/12/2017).

As baías de Chacororé e Sinhá Mariana são independentes na estiagem, mas no período das cheias, conectam-se através de corixos, por meio da planície alagável, que, em águas muito altas, a superfície total alagada chega a atingir 450 Km² (Brasil, 1974). Estes corixos funcionam como corredores de migração de peixes, entre o rio e as baías. A presença dos peixes traz grandes agrupamentos de aves aquáticas em busca de alimento. A diversidade de espécies de aves, aliada à imensa superfície de água nas baías, circundada por um relevo de morrarias, faz com que os sistemas de baías Chacororé e Sinhá Mariana tenham uma paisagem única e de grande beleza cênica.

O relevo e localização geográfica da baía influenciaram no modelo determinando as condições de contorno e velocidade do vento, mais detalhes no capítulo 2.



Figura 1.1: Localização da área de estudo: Pantanal Matogrossense, Brasil.

1.4 Modelos Matemáticos

Segundo Cajas Guaca (2015), quando restringido o campo de estudo, podemos extrair a essência do fenômeno e formalizá-la em um contexto abstrato, contudo, um problema real não pode ser representado de maneira exata por uma equação matemática ou um sistema de equações. No entanto, se escolhem as variáveis essenciais do fenômeno, para que a formalização matemática possa ser trabalhada, desenvolvida e absorvida mediante a interpretação dos resultados.

De acordo com Poletti (2009), em estudos publicados na última década sobre problemas concernentes às áreas da biologia e ecologia, pode-se verificar um forte papel da modelagem matemática favorecendo análise de estados reais e hipotéticos, cujos cenários possam ser simulados, propiciando avaliações e o estudo comparativo de estratégias, com vista a ações preventivas de conservação ou de recuperação, especialmente para os problemas estudados, de modo a minimizar os danos bioecológicos e os impactos

ambientais.

O problema de difusão atmosférica, do ponto de vista físico e matemático, é descrever o papel desempenhado pela atmosfera na redistribuição e diluição dos gases e partículas que resultam de atividades naturais e fontes antropogênicas. Os modelos matemáticos são um instrumento particularmente útil no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera.

Estes modelos permitem uma validação do nível observado de poluentes, o efeito das emissões e podem ser utilizados para evitar eventos críticos de poluição, discriminar os efeitos de várias fontes e de vários poluentes, estimarem o impacto de novas fontes, e da mesma forma validar o estado da qualidade do ar em um determinado lugar (PASQUILL, 1974).

Segundo o autor, a alta capacidade dispersiva da atmosfera resulta de sua natureza turbulenta. Turbulência é uma propriedade de fácil identificação mas de difícil definição, composta de movimentos irregulares e caóticos que estão presentes em todos os escoamentos de aplicações práticas. De fato, a maioria dos problemas meteorológicos relacionados com regiões industriais e populosas está governada pelo problema de difusão turbulenta.

O problema da difusão turbulenta na atmosfera não foi ainda formulado de forma única no sentido de que não existe um único modelo físico capaz de explicar todos os aspectos relevantes.

Os modelos Eulerianos consideram o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço. Já os modelos Lagrangeanos utilizam um sistema de referência que segue o movimento do poluente. Operacionalmente existem duas abordagens a saber: a Teoria do Transporte por Gradiente (TTG) ou como também é denominada teoria 'K' e a Teoria Estatística de Difusão (TED). A TTG afirma que o transporte em uma região da atmosfera é proporcional ao gradiente local da concentração, portanto, é uma teoria Euleriana. A TED considera o movimento individual das partículas do fluido, sendo assim, é classificada como uma teoria Lagrangeana.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera emprega-se, normalmente, a equação parcial de difusão-advecção que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação de continuidade. Sob certas condições pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma (PASQUILL, 1974).

Nesta equação são incorporados fatores microscópicos e macroscópicos tais como os que ocorrem em fenômenos de dispersão, na concepção de difusão 'efetiva', como citado e usado por Marchuk (1986) e Okubo (1980), o transporte advectivo, os fenômenos de degradação e possíveis fontes de material impactante que possam ocorrer (POLETTI, 2009).

Em Meyer e Diniz (2007), foi proposto um modelo que engloba a dispersão de poluentes tanto no meio aéreo quanto no meio aquático, em regiões a serem preservadas próximas à atividades agro-industriais, como acontece na parte norte do Pantanal Matogrossense. Tal modelo foi testado para a situação real de dispersão de agrotóxicos na região de *Esteros del Ibera* (região nordeste da Argentina).

Ainda neste sentido, destaca-se Inforzato (2008) que estendeu este problema evolutivo de difusão-advecção num sistema de poluição tridimensional.

Capítulo 2

A Modelagem Clássica do Problema

Este capítulo aborda a equação de difusão-advecção e suas particularidades na modelagem do problema, que será tratada de forma dimensionalizada nesta abordagem. Seja $u(x, y; t)$ a concentração de metano no meio em estudo no ponto (x, y) e no instante t . Um modelo geral para este problema, é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \{\text{difusão}\} - \{\text{advecção}\} - \{\text{degradação}\} + \{\text{fonte}\}$$

onde, em termos de modelagem clássica do fenômeno, se tem:

$$\begin{aligned}\{\text{difusão}\} &= \text{div}[\alpha \nabla u] && (\text{OKUBO, 1980}) \\ \{\text{advecção}\} &= \text{div}[\vec{\nabla}.u] && (\text{DINIZ 2003}) \\ \{\text{degradação}\} &= \text{cte}.u = \sigma u && (\text{BASSANEZI 2002})\end{aligned}$$

O fenômeno da difusão é o processo pelo qual uma substância é transferida de uma parte de um sistema para outra, resultado tanto de movimentos moleculares aleatórios (em escala microscópica) quanto resultados de efeitos de turbulência (em escala macroscópica), na equação o parâmetro α representa o processo de difusão efetiva.

O transporte advectivo é o fluxo provocado por agentes externos. Neste caso, a movimentação se dá na mesma direção do campo de velocidades, $\vec{\nabla}$, e a quantidade movida é a própria concentração no ponto. Em trabalhos futuros, para uso de modelo tridimensional com a inclusão do eixo vertical (z), deverão ser considerados a ação da

gravidade e o empuxo para fins de modelagem, o que não é o caso nesta abordagem em que foram adotados planos paralelos à superfície da Terra.

A degradação é um fenômeno molecular que descreve, de modo amplo, aquela fração de partículas da substância que reagem com o meio externo, excluindo-se do cenário durante o processo. O principal mecanismo de remoção do metano da atmosfera é a reação com a hidroxila (OH), que ajuda a controlar a quantidade de OH na atmosfera. Outros sumidouros menores são a oxidação de solo seco e o transporte para a estratosfera. Neste modelo, o parâmetro associado a este fenômeno está representado por σ como sendo a degradação global.

Assim, a equação que modela o fenômeno da dispersão de um determinado gás, considerado como incompressível, num domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, com $t \in (0, T] \subset \mathbb{R}$, para algum $T > 0$, é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \text{div}[\alpha \nabla u] - \text{div}[\vec{\nabla}.u] - \sigma u + f, \quad (2.1)$$

em que:

- $\alpha = \alpha(x, y; t)$ é o coeficiente de difusibilidade efetiva no meio;
- $\vec{\nabla} = \vec{\nabla}(x, y; t) = (v_x(x, y; t); v_y(x, y; t))$ o campo de velocidades no meio, com $\text{div}[\vec{\nabla}] = 0$;
- $\sigma = \sigma(x, y; t)$ o coeficiente de degradação total no meio;
- $f = f(x, y; t)$ é o termo fonte.

A fonte, principal e relevante contribuição do presente trabalho na modelagem, considerada macroscopicamente, é levada em conta pela possibilidade de ingresso do metano no meio, numa quantidade que depende de situações externas. Este ingresso será considerado somente a partir da área alagada, tendo em vista a sua produção a partir da matéria orgânica em decomposição, como descrito no primeiro capítulo. Para a função que representa o termo fonte na equação (2.1), foi considerada a função periódica com período de um dia, dada por

$$f(x, y; t) = q + \frac{Ap}{2} \cos(\omega t)$$

sendo t considerado em horas; q a concentração média de metano que ingressa na atmosfera no ponto (x, y) do domínio localizado na água; Ap é a diferença entre as concentrações máxima e mínima que ingressam na atmosfera, e ω é o período relativo ao ciclo diário, devido ao fluxo diurno e noturno, neste caso, $\omega = \frac{\pi}{12} = \frac{2\pi}{24}$.

De acordo com o domínio Ω descrito abaixo, serão considerados a condição inicial

$$u(x, y; 0) = u_0(x, y), \quad (x, y) \in \Omega \quad (2.2)$$

e condições de contorno:

- A região da fronteira onde está situada a Serra de São Vicente, foi considerado que não há passagem do gás, adotando assim a condição do tipo Von Neumann homogênea:

$$\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = 0 \quad (2.3)$$

- Na parte livre de morrarias da fronteira foram consideradas perdas proporcionais à quantidade presente na respectiva fronteira. Essa situação é modelada usando uma condição do tipo Robin:

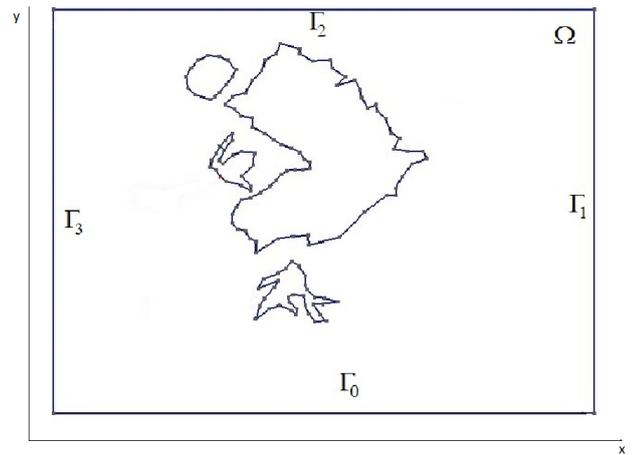
$$\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0, \Gamma_3} = \beta u \quad (2.4)$$

em que η é o vetor normal exterior unitário ao longo da fronteira do domínio.

A figura 2.1-a apresenta a imagem de satélite da área de estudo, obtida pelo Google Earth em 30/09/2015, e a figura 2.1-b representa o domínio Ω em que foram identificadas as fronteiras e delimitadas as áreas alagadas. A região tem aproximadamente $616km^2$ de extensão, com dimensões máximas $28km$ em x e $22km$ em y . Sendo o modelo proposto para a baixa atmosfera, até $100m$ de altitude, tais dimensões justificam o domínio como bidimensional, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$.



(a) Imagem de satélite da área de estudo (domínio Ω).



(b) Descrição do domínio Ω .

Figura 2.1: Área de estudo e domínio Ω

Capítulo 3

Formulação Variacional e Discretização

Dado o domínio e a Equação a Derivadas Parciais, não há solução analítica que possa ser expressa com funções elementares, embora haja existência e unicidade dessa solução, mas apenas num contexto variacional. A seguir é construída a formulação variacional do problema, com base nas equações (2.1) a (2.4). Isso se faz necessário, visando a aplicação do Método de Elementos Finitos, via Galerkin Standard para discretização espacial, a fim de obter uma aproximação numérica da solução. Ainda neste capítulo, é feita a discretização temporal utilizando o método de Crank-Nicolson, por se tratar de um método incondicionalmente estável.

3.1 Formulação Variacional

A formulação variacional propicia um maior campo de ação, pois facilita a demonstração da existência e unicidade da solução e permite o uso de algoritmos computacionais mais flexíveis e robustos. A formulação variacional reduz a ordem diferencial do problema, simplificando-o em relação à sua forma original de modo que tenha uma solução equivalente, denominada solução fraca.

O processo para obtenção da formulação variacional é desenvolvido da seguinte

forma:

1. Consideram-se as derivadas no sentido de distribuições (ver Apêndice A);
2. Multiplica-se cada termo da equação por uma função teste, ν , pertencente a um subespaço conveniente \mathcal{U} de

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

e integra-se no sentido de Lebesgue sobre Ω .

O espaço \mathcal{U} a ser considerado é dado por:

$$\mathcal{U} = \{\nu \in H^1(\Omega) : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_1 \text{ e } \Gamma_2, \forall t \in [0, T]\}.$$

Em \mathcal{U} o produto interno é representado por:

$$(u, w)_\Omega = \iint_\Omega u w d\mu$$

$$(\vec{u} || \vec{w})_\Omega = \iint_\Omega \vec{u} \cdot \vec{w} d\mu$$

$$\langle u, w \rangle_\Gamma = \int_\Gamma u w d\gamma$$

Assim, multiplicando a equação (2.1) por $\nu \in \mathcal{U} \subset H^1(\Omega)$ e integrando em relação à variável espacial, obtém-se

$$\iint_\Omega \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu = \iint_\Omega \nabla[\alpha \nabla u] \nu d\mu - \iint_\Omega \nabla \cdot [\vec{\nabla} u] \nu d\mu - \iint_\Omega \sigma u \nu d\mu + \iint_\Omega f \nu d\mu.$$

Organizando os termos adequadamente, vem:

$$\iint_\Omega \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \alpha \iint_\Omega \nabla(\nabla u) \nu d\mu + \iint_\Omega (\vec{\nabla} \cdot \nabla u) \nu d\mu + \iint_\Omega \sigma u \nu d\mu = \iint_\Omega f \nu d\mu,$$

e, fazendo uso de uma identidade de Green no segundo termo do primeiro membro da equação, tem-se:

$$\iint_\Omega \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \alpha \iint_\Omega (\nabla u \cdot \nabla \nu) d\mu - \alpha \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma + \iint_\Omega (\vec{\nabla} \cdot \nabla u) \nu d\mu + \iint_\Omega \sigma u \nu d\mu = \iint_\Omega f \nu d\mu.$$

Como $\partial\Omega = \bigcup_{i=0}^3 \Gamma_i$, utilizando aqui as condições de fronteira:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \alpha \iint_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla \nu) d\mu - \int_{\Gamma_0} \beta u \nu d\gamma - \int_{\Gamma_3} \beta u \nu d\gamma \\ + \iint_{\Omega} (\vec{\nabla} \cdot \nabla u) \nu d\mu + \iint_{\Omega} \sigma u \nu d\mu = \iint_{\Omega} f \nu d\mu. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Esta é a formulação variacional para o problema em estudo. E, com a notação para o produto interno definido anteriormente:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial t}, \nu \right)_{\Omega} + \alpha_u (\nabla u || \nabla \nu)_{\Omega} - \beta \langle u, \nu \rangle_{\Gamma_0} - \beta \langle u, \nu \rangle_{\Gamma_3} + \left(\vec{\nabla} \cdot \nabla u, \nu \right)_{\Omega} + \\ \sigma_u (u, \nu)_{\Omega} = (f, \nu)_{\Omega}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Não será feita a demonstração da existência e unicidade da solução da equação (3.2) uma vez que os procedimentos adotados em Diniz (2003), Castro (1993) e Mistro (1992) garantem-na, já que o modelo aqui proposto recai sobre a tipologia do modelo proposto por esses autores e demonstrado em Diniz (2003).

3.2 Discretização espacial: Galerkin Standard

O Método dos Elementos Finitos, via Galerkin Standard, 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, ver Carey e Oden (1981). Para isto, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada por (3.2).

Seja \mathcal{U}^h subespaço de \mathcal{U} gerado pela base $\mathcal{B} = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{n_h}\}$ cujas funções φ_i são chamadas funções base. Assim, a solução u^h de (3.2) no subespaço de \mathcal{U} pode ser escrita como combinação linear dos elementos de \mathcal{B} :

$$u^h = \sum_{i=1}^{n_h} u_i(t) \varphi_i(x, y).$$

A equação (3.2) com u^h e $\nu \in \mathcal{U}^h$ se torna:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u^h}{\partial t}, \nu \right)_{\Omega} + \alpha (\nabla u^h || \nabla \nu)_{\Omega} - \beta \langle u^h, \nu \rangle_{\Gamma_0} - \beta \langle u^h, \nu \rangle_{\Gamma_3} + \left(\vec{\nabla} \cdot \nabla u^h, \nu \right)_{\Omega} + \\ \sigma (u^h, \nu)_{\Omega} = (f, \nu)_{\Omega} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{i=1}^{n_h} \frac{du_i}{dt} \varphi_i, \nu \right)_{\Omega} + \alpha \left(\sum_{i=1}^{n_h} u_i \nabla \varphi_i \parallel \nabla \nu \right)_{\Omega} - \beta \left\langle \sum_{i=1, i \in \Gamma_0}^{n_h} u_i \varphi_i, \nu \right\rangle_{\Gamma_0} - \\ & - \beta \left\langle \sum_{i=1, i \in \Gamma_3}^{n_h} u_i \varphi_i, \nu \right\rangle_{\Gamma_3} + \left(\sum_{i=1}^{n_h} u_i (\vec{\nabla} \cdot \nabla \varphi_i), \nu \right)_{\Omega} + \sigma \left(\sum_{i=1}^{n_h} u_i \varphi_i, \nu \right)_{\Omega} = (f, \nu)_{\Omega}. \end{aligned}$$

Como as componentes u_i dependem somente de t pode-se tirá-las do produto interno, e, assim:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_h} \frac{du_i}{dt} (\varphi_i, \nu)_{\Omega} + \alpha \sum_{i=1}^{n_h} u_i (\nabla \varphi_i \parallel \nabla \nu)_{\Omega} - \beta \sum_{i=1, i \in \Gamma_0}^{n_h} u_i \langle \varphi_i, \nu \rangle_{\Gamma_0} - \beta \sum_{i=1, i \in \Gamma_3}^{n_h} u_i \langle \varphi_i, \nu \rangle_{\Gamma_3} + \\ \sum_{i=1}^{n_h} u_i \left(\vec{\nabla} \cdot \nabla \varphi_i, \nu \right)_{\Omega} + \sigma \sum_{i=1}^{n_h} u_i (\varphi_i, \nu)_{\Omega} = (f, \nu)_{\Omega}. \end{aligned}$$

A equação acima é válida para qualquer $\nu \in \mathcal{U}^h$, assim sendo, é suficiente analisá-la somente sobre os elementos da base \mathcal{B} . Assim,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_h} \frac{du_i}{dt} (\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega} + \alpha \sum_{i=1}^{n_h} u_i (\nabla \varphi_i \parallel \nabla \varphi_j)_{\Omega} - \beta \sum_{i=1, i \in \Gamma_0}^{n_h} u_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_0} - \\ \beta \sum_{i=1, i \in \Gamma_3}^{n_h} u_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_3} + \sum_{i=1}^{n_h} u_i \left(\vec{\nabla} \cdot \nabla \varphi_i, \varphi_j \right)_{\Omega} + \sigma \sum_{i=1}^{n_h} u_i (\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega} = \\ (f, \varphi_j)_{\Omega}, \quad \forall \varphi_j \in \mathcal{B} \end{aligned} \quad (3.3)$$

daí, obtem-se um sistema de EDO's de primeira ordem discretizado. Fazendo $u^h = (u_1, u_2, \dots, u_{n_h})^T$ pode-se escrever:

$$A \frac{du^h}{dt} + Bu^h = C \quad (3.4)$$

em que $A = (a_{ij})_{n_h \times n_h}$, $B = (b_{ij})_{n_h \times n_h}$ e $C = (c_i)_{n_h}$ com:

$$a_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega},$$

$$b_{ij} = \alpha (\nabla \varphi_i \parallel \nabla \varphi_j)_{\Omega} - \beta (\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_0} + \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_3}) + \left(\vec{\nabla} \cdot \nabla \varphi_i, \varphi_j \right)_{\Omega} + \sigma (\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega} \text{ e}$$

$$c_i = (f, \varphi_i)_{\Omega}.$$

A escolha das funções base φ_i será a de elementos finitos de primeira ordem, que consiste em:

- Construir uma malha (dos elementos finitos) sobre o domínio Ω e aqui, a opção foi por elementos finitos triangulares dentre os vários polígonos existentes, conforme adotado no método de Galerkin standard (ver Carey e Oden, 1981), pela simplicidade (menor número de nós e arestas), utilizando o auxílio do software Gmesh (Figura 3.1).
- Escolher as funções base $\{\varphi_i, i = 1, \dots, n_h\}$ definidas globalmente, do tipo linear por partes e tais que

$$\varphi_i(b_j) = \delta_{ij} \text{ e } \varphi_i \in P(\Omega) \text{ sobre cada elemento finito.} \quad (3.5)$$

sendo δ_{ij} é o operador *delta de Kronecker* e b_j é o *j-ésimo* nó da malha.

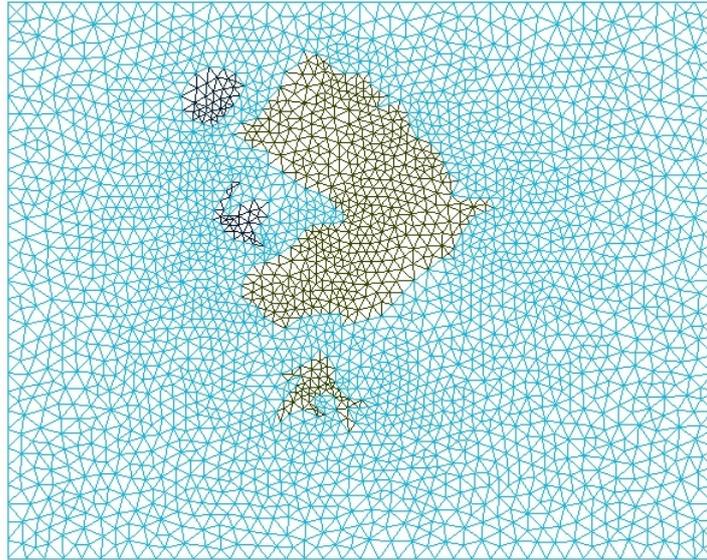


Figura 3.1: Discretização do domínio Ω .

Seja $\{\Omega_e\}_{e=1}^{T_h}$ uma família finita de T_h triângulos Ω_e , dois a dois disjuntos, ou tendo como interseção uma aresta ou um vértice, tais que:

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

Associamos a esta malha o parâmetro $h = \text{máx}\{\text{diam}(\Omega_e)\}_{e=1}^{T_h}$. A importância deste parâmetro é que, para melhorar a aproximação discreta, não basta aumentar o número de nós, isto deve ser feito com h tendendo a zero.

Considerando \mathcal{U}^h o espaço das funções polinomiais em duas variáveis de grau 1 definidas em Ω_e , de modo que

$$P_1(\Omega_e) = \{p : \Omega_e \rightarrow \mathbb{R}/p(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2, a_i \in \mathbb{R}, i = 0 : 2\}$$

assim,

$$\mathcal{U}^h = \left\{ \varphi \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) / \varphi|_{\Omega_e} \in P_1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \{\Omega_e\}_{e=1}^{T_h} \right\}$$

e adotando como base de \mathcal{U}^h as funções $\varphi_i, i = 1, \dots, nt_h$ que satisfaçam (3.5), sendo nt_h o número total de nós da malha. Neste trabalho $nt_h = 4571$.

A fim de facilitar a implementação, serão feitos todos os cálculos no triângulo com vértices $(0;0); (1;0)$ e $(0;1)$ que será denotado por triângulo de referência ($\hat{\Omega}_e$). As integrais serão calculadas localmente em cada elemento da malha, para isso será usada uma transformação afim que leve o triângulo de referência $\hat{\Omega}_e$ em um triângulo qualquer Ω_e (figura 3.2). Para cada integral será usada uma mudança de variáveis conveniente (ver Apêndice A).

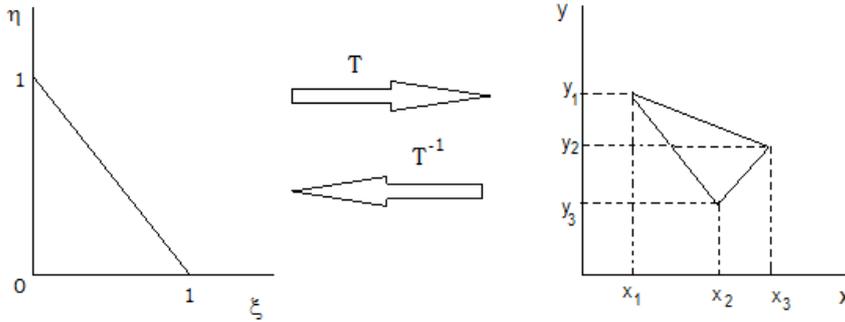


Figura 3.2: Transformação T

A transformação T é dada por:

$$T(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$

As funções $\varphi_i \in \mathcal{U}^h$ restritas ao triângulo de referência serão da forma:

$$\varphi_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta,$$

$$\varphi_2(\xi, \eta) = \xi,$$

$$\varphi_3(\xi, \eta) = \eta$$

3.3 Discretização temporal: Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson consiste em um método de diferenças finitas centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, fazendo as seguintes aproximações:

$$\frac{du_j}{dt}(t_n + \frac{\Delta t}{2}) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \quad \text{e} \quad u_j(t_n + \frac{\Delta t}{2}) \approx \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2}$$

sendo $u_j^{n+1} = u_j(t_{n+1})$.

Substituindo essas aproximações em (3.4), obtém-se:

$$A \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\Delta t} + B \frac{u_h^{n+1} + u_h^n}{2} = C^{m+\frac{1}{2}}$$

$$\left(A + \frac{\Delta t}{2} B \right) u_h^{n+1} = \left(A - \frac{\Delta t}{2} B \right) u_h^n + \Delta t C^{m+\frac{1}{2}}$$

Assim, obtém-se o sistema linear abaixo, que será resolvido iterativamente no tempo a partir da condição inicial:

$$\mathcal{A}u_h^{n+1} = \mathcal{C}u_h^n + d \tag{3.6}$$

A matriz \mathcal{A} é chamada matriz de rigidez e o vetor resultante das operações $\mathcal{C}u_h^n + d$, para cada instante $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, é denominado vetor carga.

3.4 Estudo da estabilidade

Os métodos de aproximação numérica para solução de equações de transporte, como os apresentados neste problema podem trazer sérias dificuldades quando o termo convectivo/advectivo é preponderante na equação.

Isso pode ser testado por uma comparação entre os parâmetros α e $\vec{\nabla}$ (caso constantes), se $\|\vec{\nabla}\|$ for bem maior que α , certamente aparecerão oscilações numéricas

na aproximação, quando o tamanho da malha excede um valor crítico (HEINRICH *et al.*, 1977).

A principal razão deste problema é que a matriz associada ao termo convectivo/adectivo é não simétrica, podendo gerar sistemas mal-condicionados (MOREIRA e WROBEL, 1983). Uma maneira de suprimir esse problema é usando malhas bastante refinadas, de maneira que o termo convectivo/adectivo perca sua preponderância no nível dos elementos. Mas essa estratégia aumentaria muito a ordem do sistema obtido, o que geraria um alto custo computacional.

O meio de evitar as oscilações que aparecem no sistema usado neste trabalho é conhecido como a condição de Péclet, que fornece uma condição sobre a discretização do domínio suprimindo o efeito das oscilações numéricas. O valor de Péclet é dado por

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

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Os resultados apresentados a seguir têm como propósito testar a modelagem descrita nos capítulos anteriores. Serão apresentados seis cenários para simular a dispersão do metano na região considerada, onde os códigos foram desenvolvidos em ambiente Matlab, cuja facilidade de interface gráfica é bastante satisfatória.

A variabilidade na estimativa de parâmetros é um fator de preocupação por parte de pesquisadores, que buscam valores significativos para os testes e implementações. As simulações levaram em conta parâmetros obtidos na literatura, ou seja, o projeto desta tese não envolveu a coleta de dados ou qualquer outro trabalho de campo. Assim, será dado enfoque aos resultados qualitativos que são de grande importância na validação do modelo e do código numérico proposto.

4.1 Parâmetros

Para o desenvolvimento do modelo matemático e para as simulações, alguns parâmetros foram tomados de pesquisas relacionadas e outros parâmetros foram estimados tentando da melhor forma possível manter as características das condições ambientais reais. Por exemplo, a emissão de metano em reservatórios foi obtida por Hallqvist (2012), em trabalhos de campo, com valores aproximados de 0 a $39 \mu\text{mol}/\text{km}^2$ por dia.

Nas simulações foram utilizados os parâmetros apresentados na tabela 4.1, com 40.000 iterações num intervalo de 20 dias.

Tabela 4.1: Parâmetros usados nas simulações.

Parametro	Valor	Parametro	Valor
α	0.0012 km ² /h	σ	0.015 h ⁻¹
q	0.018 mol/(km ² h)	Ap	0.028 mol/(km ² h)
β	0.01	Δt	0.012 h

Os parâmetros que diferenciam as simulações a seguir são a velocidade e a direção do vento, \vec{V} . A barra à direita dos gráficos com a intensidade de suas cores determina a concentração do metano, o qual vai desde a cor azul, que significa que não há presença do gás com concentração zero, até a cor amarela que significa a máxima concentração de metano.

4.2 Cenário 1

Para a primeira simulação, figuras (4.1) e (4.3), foi considerada a velocidade do vento $V = 2\text{km/h}$ com direção do sudoeste, ou seja, $\theta = \frac{\pi}{4}$.

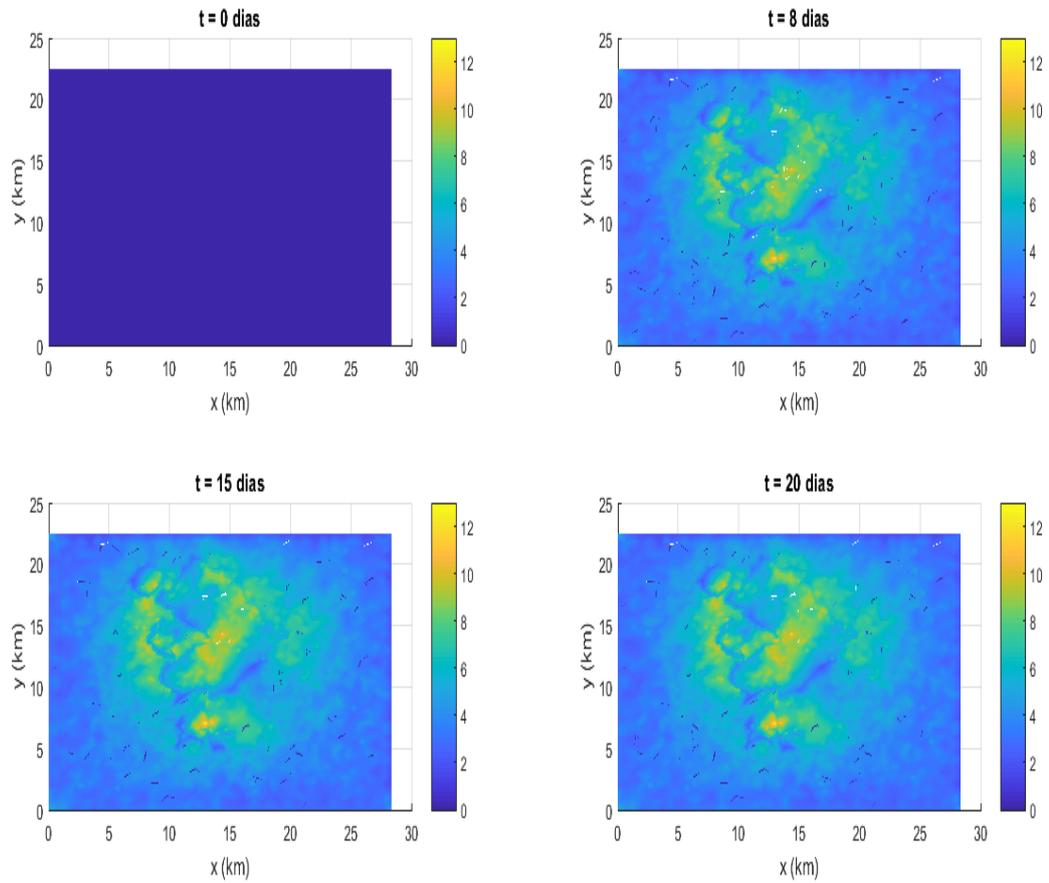


Figura 4.1: Distribuição espacial da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,52 minutos.

A produção de metano depende da temperatura, da disponibilidade de matéria orgânica e da falta de oxigênio, estes fatores são influenciados pelo clima, tamanho e profundidade do lago, e pela produtividade das plantas e animais. E, segundo Fearnside (2008), profundidades de 0-3m possuem maior emissão do que as profundidades 7-8m, o que pode ser atribuído a temperatura mais baixa da maior profundidade afetando a pressão e a solubilidade do metano.

Na figura (4.1) percebe-se o aumento da concentração com o aumento do tempo final, evidenciando o caráter dispersivo que o gás sofre ao liberar-se para a atmosfera. Uma outra observação é que o gás permanece sobre a área alagada, com uma

concentração mais acentuada na pequena área alagada inferior, Baía de Sinhá Mariana, possivelmente devido a fatores advectivos e quantidade de biomassa como fonte associada ao local.

Na figura (4.2), são selecionados 4 nós para descrever as concentrações ao longo do tempo.

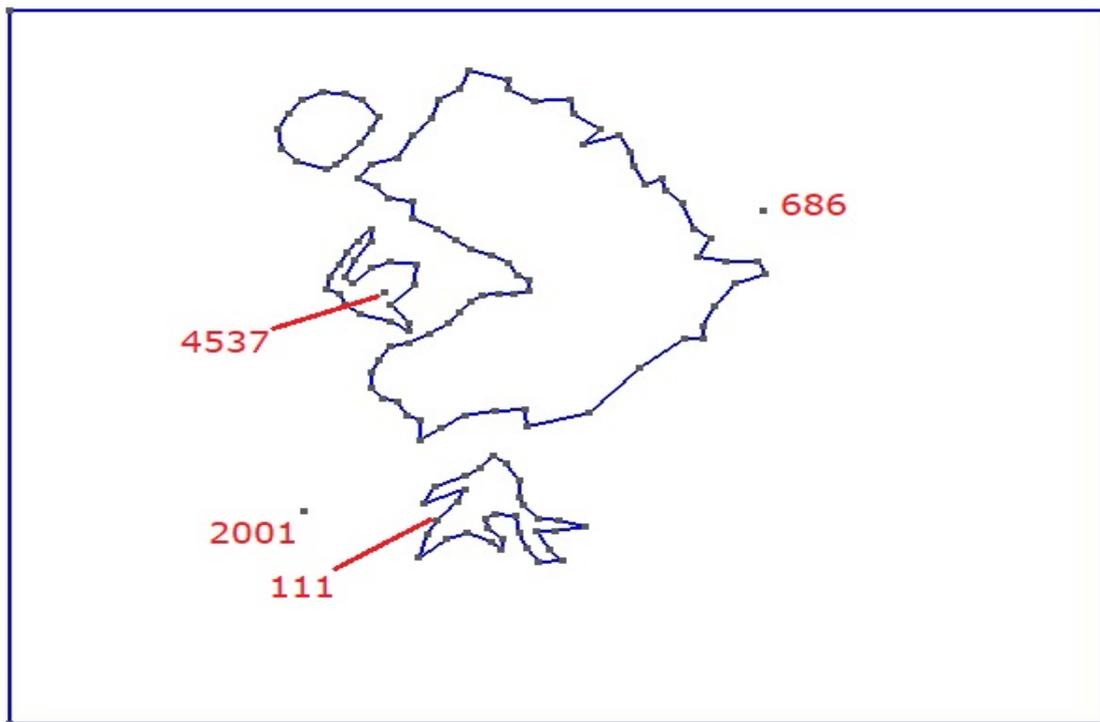


Figura 4.2: Localização dos nós escolhidos

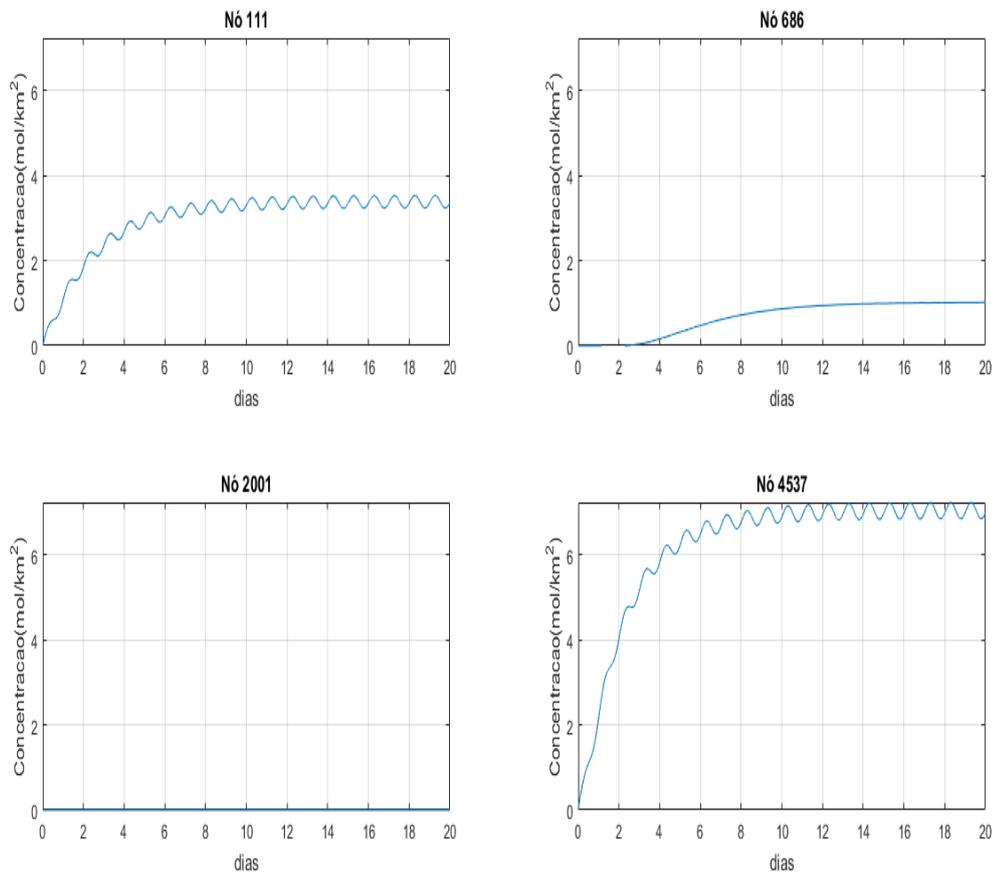


Figura 4.3: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

Como pode ser observado na figura (4.3), à medida que o tempo evolui, aumentam as concentrações nos nós 111 e 4537, de forma mais acentuada em 4537, o que sugere maior concentração de metano no interior da área alagada, enquanto que o nó 686 apresenta um pequeno aumento por estar longe de qualquer fonte mas sofrendo influência advectiva, e o nó 2001 fica isento de concentração devido sua posição fora da área alagada e contrária à direção do vento em relação às fontes.

Após atingir a concentração máxima nos nós 111 e 4537, de 6 a 10 dias, é possível observar o comportamento oscilatório. Tal comportamento é devido à variação de temperatura do dia, a qual influencia na emissão, já que esses nós estão localizados em pontos considerados fontes. Já o nó 686, que não é um ponto considerado como

fonte, assume um comportamento assintoticamente estável.

4.3 Cenário 2

Na segunda simulação, figuras (4.4) e (4.5), foi considerada a velocidade $V = 3,2\text{km/h}$ e a direção foi mantida $\theta = \frac{\pi}{4}$.

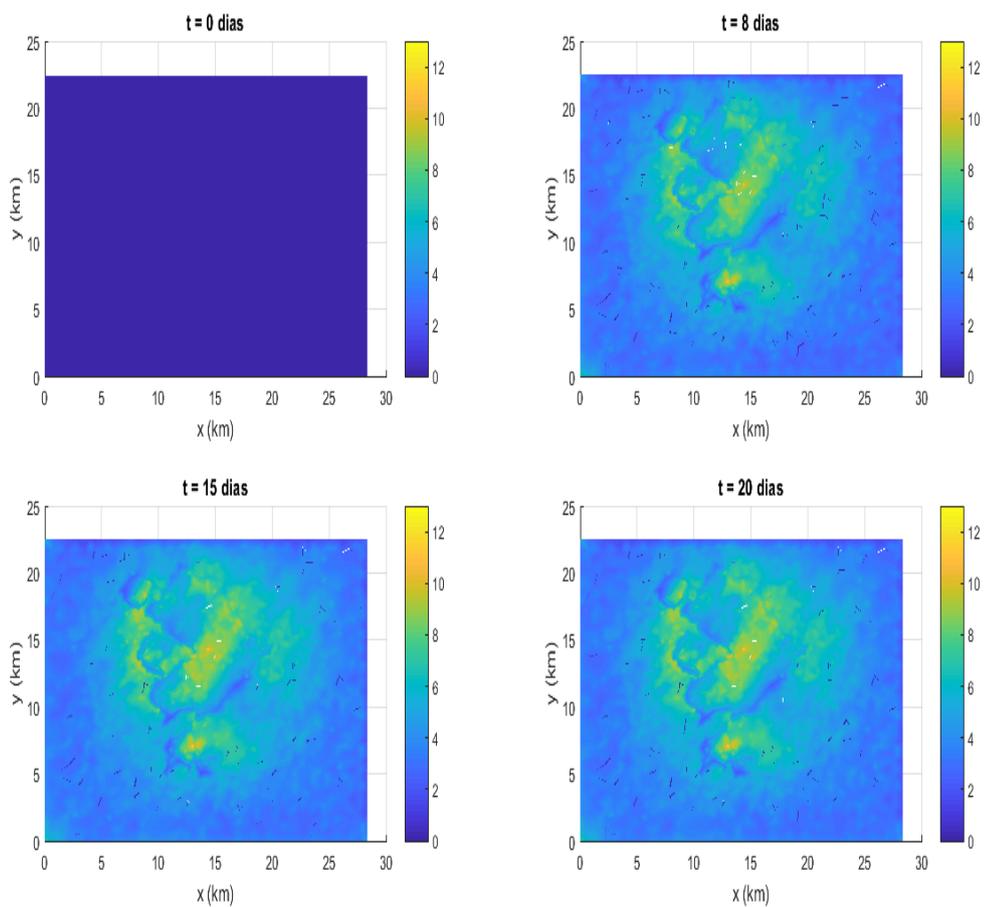


Figura 4.4: Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 51,11 minutos.

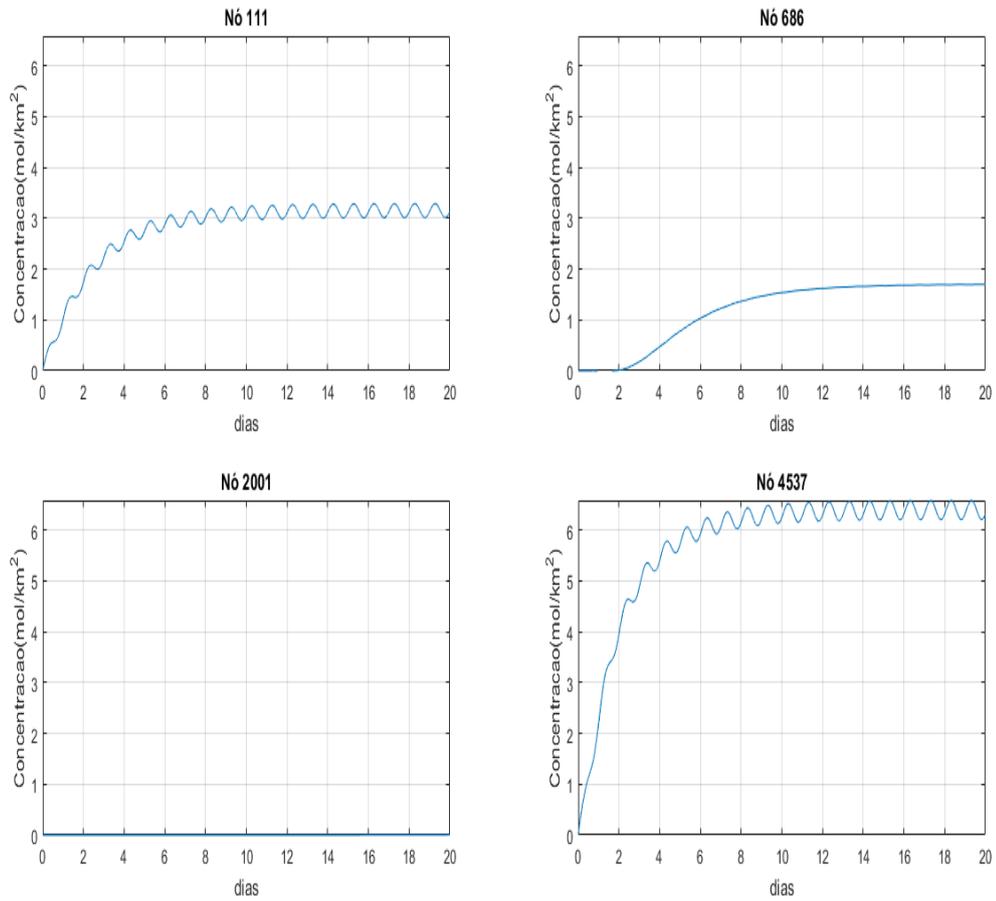


Figura 4.5: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

Com o aumento da velocidade acontece um leve aumento para o nó 686 e uma leve diminuição para o nó 111 em relação à concentração máxima que o gás atinge nestes pontos na simulação anterior.

4.4 Cenário 3

Para a terceira simulação, figuras (4.6) e (4.7), foi considerada a velocidade $V = 2,5 \text{ km/h}$ com direção ainda $\theta = \frac{\pi}{4}$.

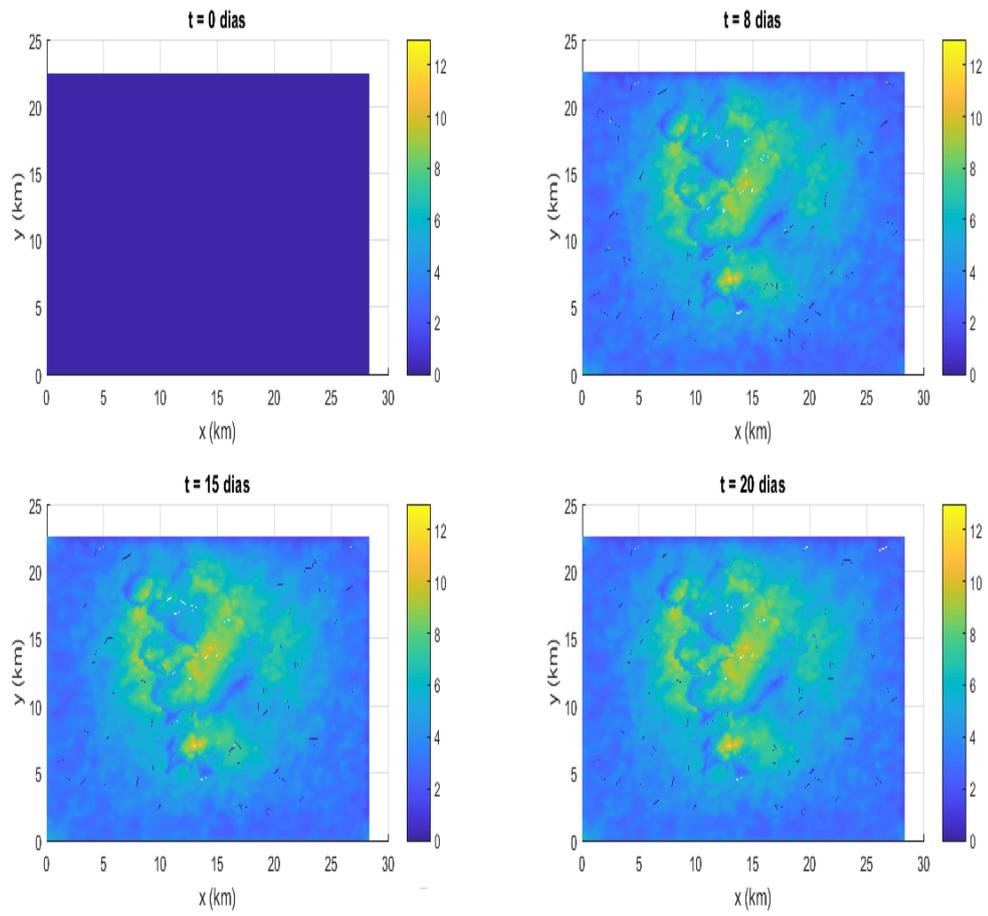


Figura 4.6: Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,62 minutos.

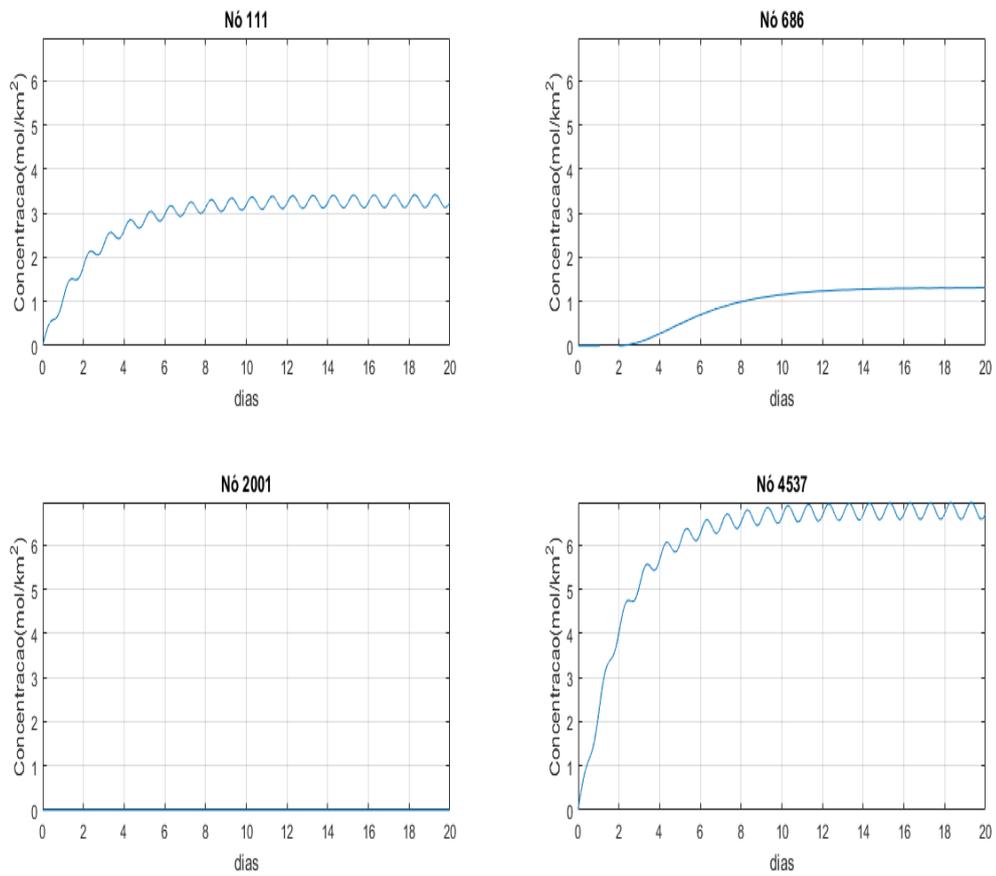


Figura 4.7: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

Observa-se um comportamento semelhante entre os três cenários, pouca influência do vento, dispersão lenta, concentração do gás predominantemente sobre a área alagada. Comportamento da concentração idêntico também para os quatro nós escolhidos, com concentração máxima do metano assumindo valores intermediários para os nós 111 e 686 entre essa simulação e as simulações anteriores.

4.5 Cenário 4

Para a quarta simulação, figuras (4.8) e (4.9), velocidade do vento $V = 5,0 km/h$ com direção do oeste, ou seja, $\theta = 0$.

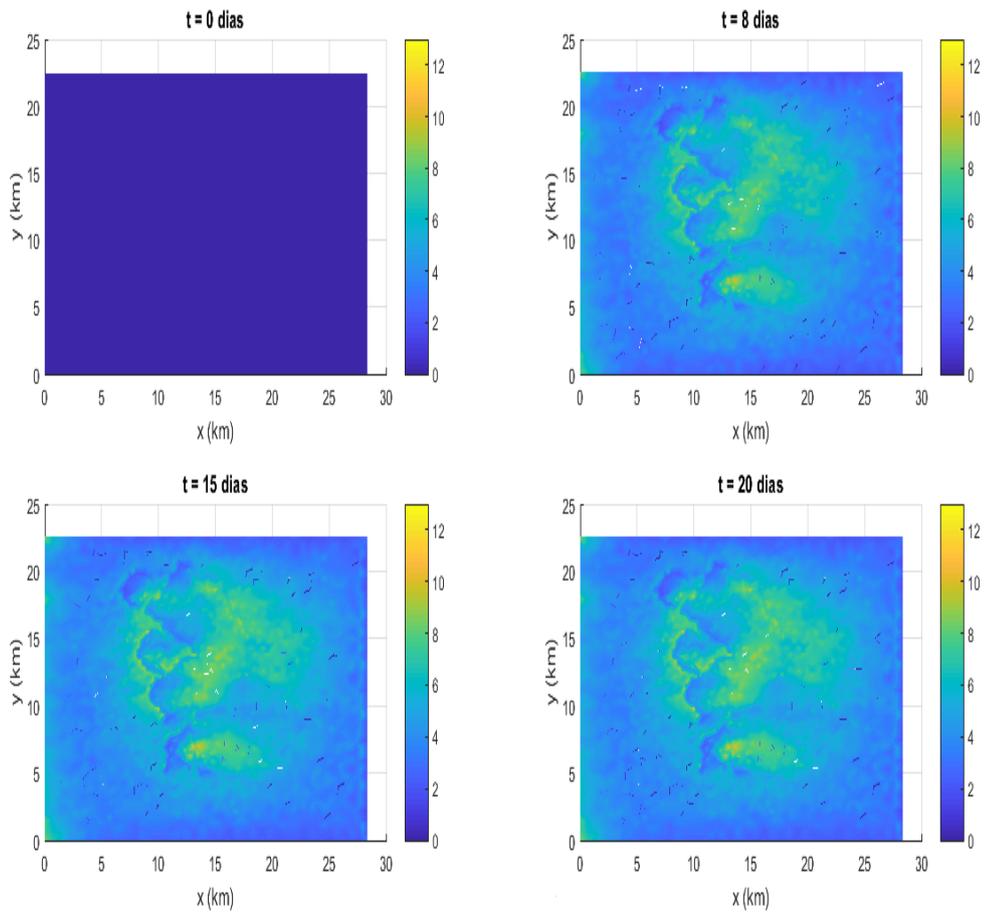


Figura 4.8: Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,42 minutos.

Com o aumento da velocidade do vento se nota um maior espalhamento do gás, figura (4.8), mas com grande concentração ainda sobre a área alagada.

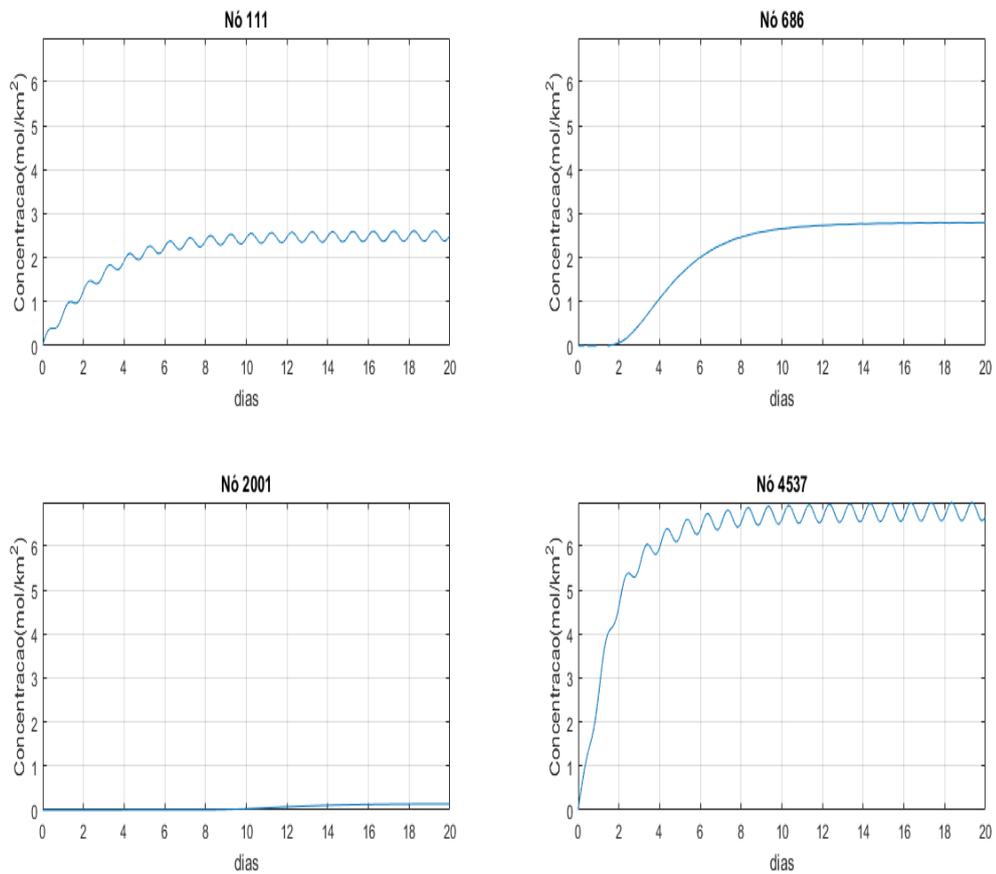


Figura 4.9: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

Para o nó 686 houve um maior aumento na concentração máxima, figura (4.9) onde, mesmo não sendo um ponto considerado como fonte, atingiu uma concentração um pouco maior que o nó fonte 111, e para este último observa-se um significativo decaimento na concentração devido a intensidade e direção do vento. Já o nó 2001 agora esboça uma pequena concentração do gás após 14 dias.

4.6 Cenário 5

Para a quinta simulação, figuras (4.10) e (4.11), dobrou-se a velocidade do vento $V = 10km/h$ com direção do nordeste, ou seja, $\theta = \frac{-3\pi}{4}$.

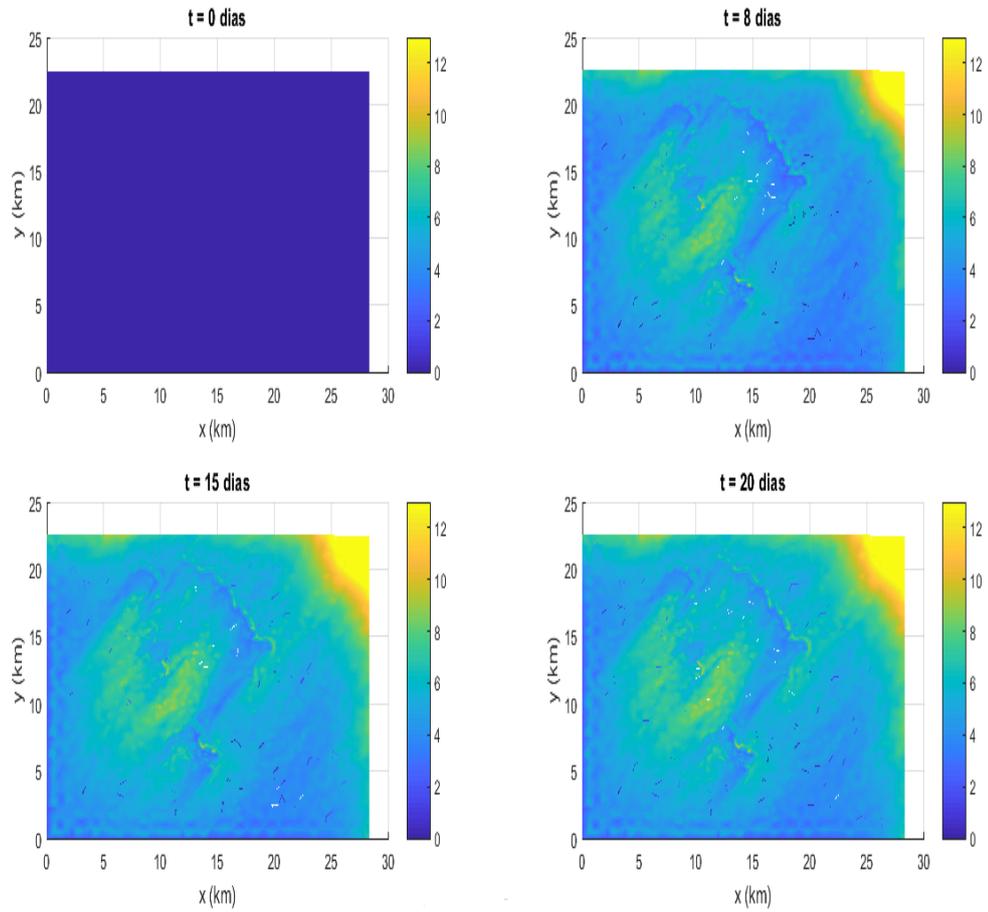


Figura 4.10: Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,56 minutos.

Neste cenário fica evidente a ação do vento, respeitando o caráter dispersivo do metano, o qual atinge concentração máxima em todos os pontos do domínio. Devido ao relevo de morrarias, é acumulada uma grande concentração do gás no canto superior direito, figura (4.10), que acaba atuando como um tipo de fonte, espalhando a mancha de poluente mesmo em pontos que estão contrários as fontes em relação ao vento. Tal fenômeno é chamado fenômeno de bordo, devido às condições de fronteira.

Para os nós, observa-se que os dois nós fontes 111 e 4537, atingem altas concentrações, figura(4.11), com uma diminuição na concentração máxima para o nó 4537 e um acentuado aumento para o nó 111, comparando com os cenários anteriores. O

nó 2001, agora na direção do vento em relação as fontes, atinge rapidamente uma concentração máxima devido a advecção. E o nó 686, mesmo estando contrário ao vento em relação as fontes, sofre também influencia advectiva atingindo concentração significativa após 6 dias.

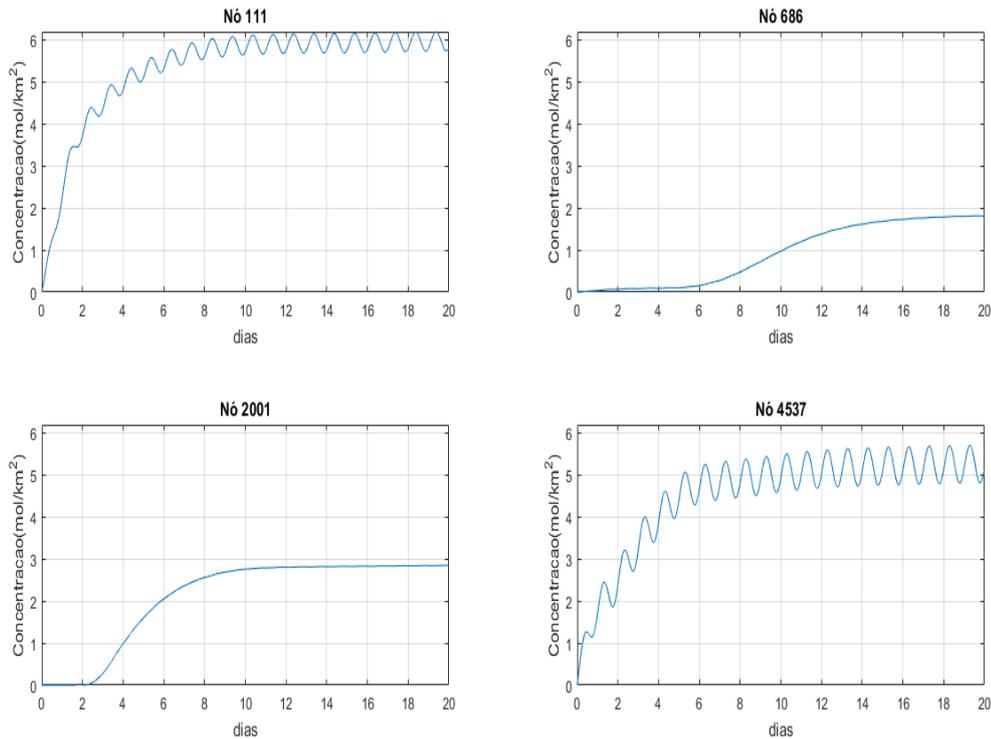


Figura 4.11: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

4.7 Cenário 6

Para a última simulação, figuras (4.12) e (4.13), foi mantida a velocidade do vento $V = 10\text{km/h}$ com direção do sudeste, ou seja, $\theta = \frac{3\pi}{4}$.

Esta simulação tem comportamento semelhante ao anterior, figura(4.12), onde a ação do vento juntamente com o relevo de morrarias acumula grande concentração do metano, agora no canto inferior direito, e acontece a dispersão do poluente por todo o domínio.

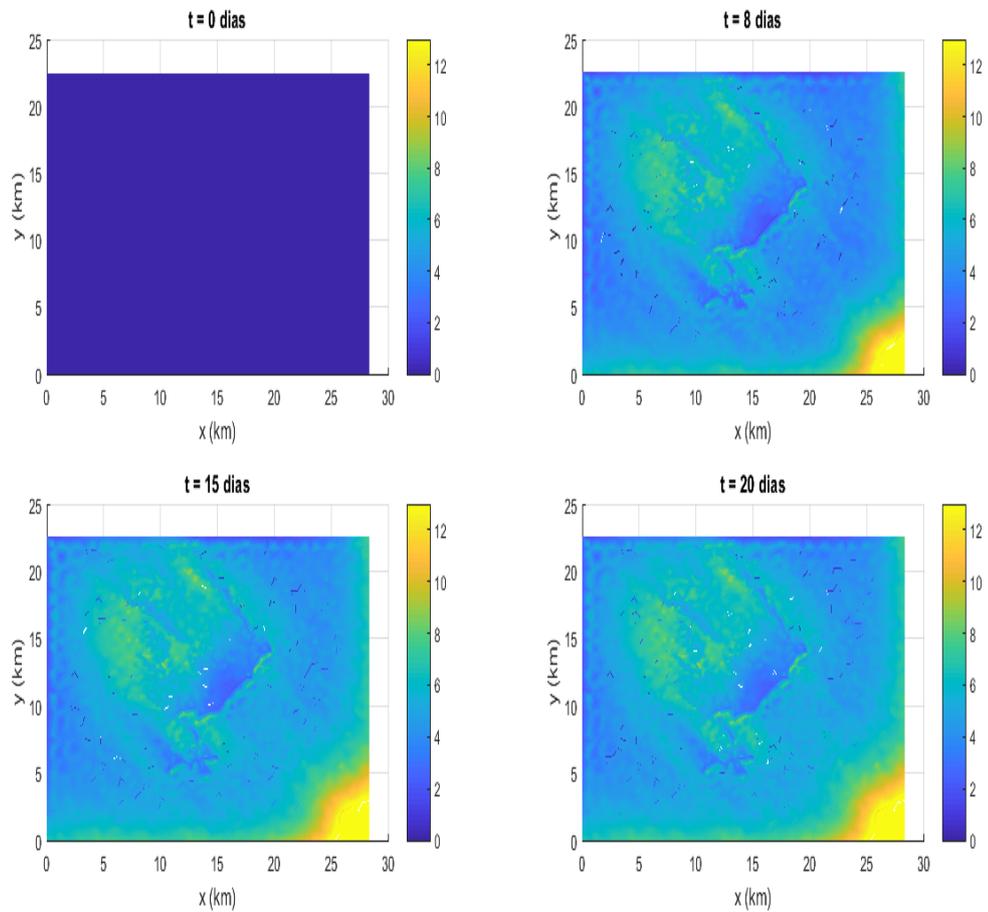


Figura 4.12: Distribuição da concentração de metano na região Ω para 4 períodos de tempo. Tempo de execução 47,36 minutos.

Devido à localização dos nós escolhidos, a concentração do metano diminui, figura(4.13), em relação à simulação anterior, aumentando somente para o nó 4537 que está situado na direção do vento em relação à área alagada. Os nós 686 e 2001, mesmo não estando na direção do vento em relação às fontes consideradas, recebem influência advectiva e atingem pequena concentração.

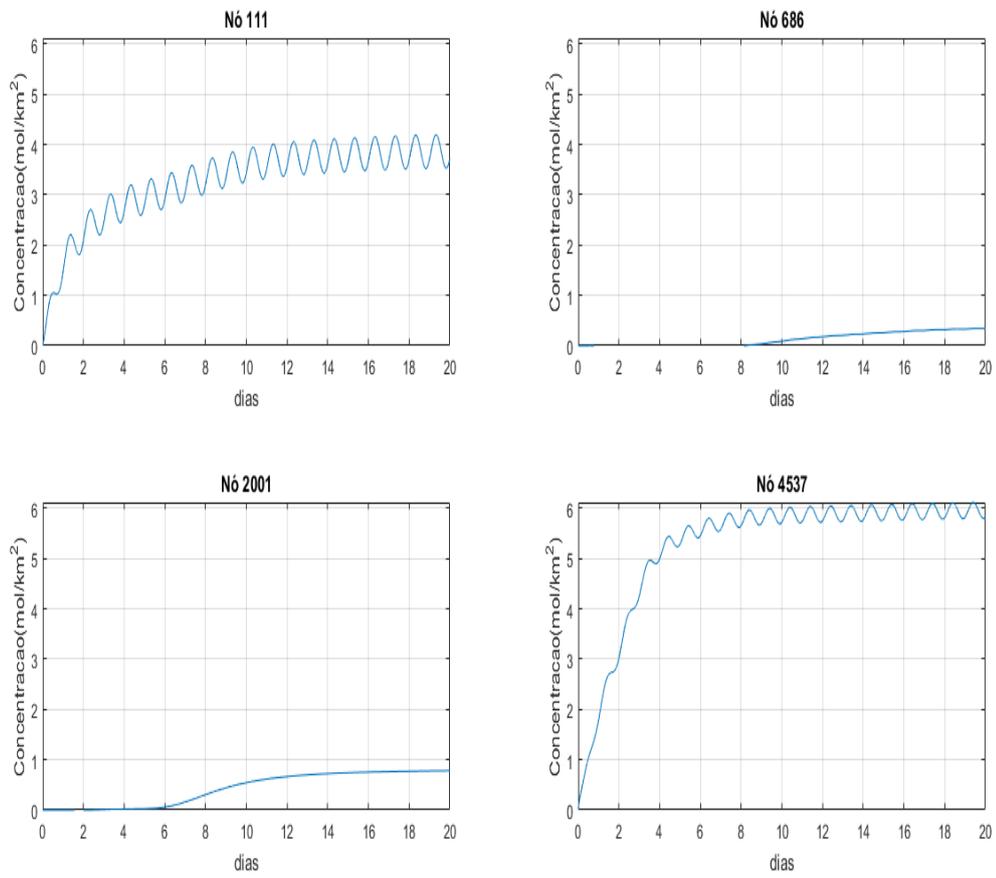


Figura 4.13: Concentração para os 4 nós escolhidos no domínio Ω

Capítulo 5

Cosiderações Finais

Nas simulações apresentadas, os resultados mostraram-se de acordo com as expectativas para os fenômenos considerados. O modelo então adotado foi representativo para o fenômeno em estudo.

Sobre o código numérico implementado, foi considerado bem eficiente tanto pela robustez quanto pelo tempo de execução, produzindo resultados satisfatórios e de acordo com as expectativas.

Para trabalhos futuros, será interessante a inclusão de uma variável espacial, fazendo uma abordagem tridimensional do modelo. Além disso, se pode considerar a fonte fora da água, de acordo com a sazonalidade do alagamento da região.

Tendo em vista a escassez de trabalhos sobre o tema aqui abordado, este trabalho resultou num importante ponto de partida, através do qual oportunidades futuras a curto, médio e longo prazo se constituem em desafio viável e altamente motivador.

Bibliografia

- [1] ALVALA, P.C., KIRCHHOFF, V.W.J.H., PAVÃO, H.G. **Metano na atmosfera: produção de metano em regiões de queimadas e áreas alagadas.** BioTecnologia, Ciência e Desenvolvimento, v.7, 40-43, 1999.
- [2] BASSANEZI, R.C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática.** Ed. Contexto, São Paulo/SP, 2002
- [3] BASSET, M. e SEINFELD, J., **Atmospheric equilibrium model of sulfate and nitrate aerosols** Atmos. Environ., v.17, 2237 , 1983.
- [4] BASSO, L. S. **Determinação da Emissão de Metano na Bacia Amazônica.** Tese de Doutorado, IPEN - USP, São Paulo/SP, 2014.
- [5] BERTO NETO, J. **Medidas da emissão de gases em oito aterros de resíduos sólidos urbanos do estado de São Paulo.** Tese de Doutorado. EESC - USP, São Carlos/SP, 2009.
- [6] BRASIL. Ministério do Interior. Departamento Nacional de Obras e Saneamento. Estudos Hidrológicos da Bacia do Alto Paraguai: Relatório Técnico. Rio de Janeiro, v.1 e v.4, 1974.
- [7] BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Biomass: Pantanal** Disponível em: <<http://www.mma.gov.br/biomass/pantanal>>. Acesso em 24 de maio de 2016.
- [8] CAJAS GUACA, D. **Impacto ambiental em meios aquáticos : modelagem, aproximação e simulação de um estudo na Baía de**

- Buenaventura-Colômbia** Dissertação de Mestrado, IMEEC–UNICAMP, Campinas/SP, 2015.
- [9] CAREY, G.F., ODEN, J.T **Finite Elements: mathematical aspects**. Prentice Hall, Inc., v.4, Englewood Cliffs, 1981.
- [10] CASTRO, A.L.C., CALHEIROS, L.B. e MOURA, A.Z.B. Manual de desastres mistos volume iii. Technical report, Ministério da Integração Nacional, Secretaria Nacional de Defesa Civil, 2002.
- [11] CASTRO, S.P.E. **Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar** Dissertação de Mestrado, IMEEC–UNICAMP, Campinas/SP, 1993.
- [12] COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL (2009). **Proclima: programa estadual de mudanças climáticas** Disponível em: <<http://cetesb.sp.gov.br/proclima/gases-do-efeito-estufa/>>. Acesso em 7 de março de 2018.
- [13] DINIZ, G.L. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações**. Tese de Doutorado, FEEC–UNICAMP, Campinas/SP 2003.
- [14] FEARNSIDE, Philip M. **Hidrelétricas como "Fábricas de Metano": O Papel dos Reservatórios em Áreas de Floresta Tropical na Emissão de Gases de Efeito Estufa**. Oecol. Bras., 12(1) : 100 – 115, 2008.
- [15] HALLQVIST, E. **Methane emissions from three tropical hydroelectrical reservoirs**. Dissertação de Mestrado, Uppsala Universty, Sweden, 2012.
- [16] HEINRICH, J.C. *et al.* An upwind finite elements scheme for two-dimensional convective transport equation. **Int. J. for Numerical Methods in Engineering** 11, pp. 131-143. 1977

- [17] **IBGE - Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística, 2016.** Disponível em: <<http://cidades.ibge.gov.br/painel/historico.php?codmun=510250>>. Acesso em 24 de maio de 2016.
- [18] **INFORZATO, N.F. Dispersão de Poluentes num Sistema ar-água: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional** Tese de Doutorado, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP 2008.
- [19] **IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change - Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change** Stocker, T.F., Qin D., Plattner, G.K., Tignor, M.M.B., Allen, S.K., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V. and Midgley, P.M. (eds). Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 1535p., 2013.
- [20] **IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change - Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change** eds. Solomon, S., Qin D., Manning, M., Avert, K., Tignor, M.M.B., Miller Jr, H.L., Chen, Z. Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [21] **KIRSCHKE, S., BOUSQUET, P., CIAIS, P., SAUNOIS, M., CANADELL, J.G., DLUGOKENCKY, E.J., BERGAMASCHI, P., BERGMANN, D., BLAKE, D.R., BRUHWILER, L., CAMERON-SMITH, P., CASTALDI, S., CHEVALLIER, F., FENG, L., FRASER, A., HEIMANN, M., HODSON, E.L., HOUWELING, S., JOSSE, B., FRASER, P.J., KRUMMEL, P.B., LAMARQUE, J.F., LANGENFELDS, R.L., QUÉRÉ, C.L., NAIK, V., O'DOHERTY, S., PALMER, P.I., PISON, I., PLUMMER, D., POULTER, B., PRINN, R.G., RIGBY, M., RINGEVAL, B., SANTINI, M., SCHMIDT, M., SHINDELL, D.T., SIMPSON, I.J., SPAHNI, R., STEELE, L.P., STRODE, S.A., SUDO,**

- K., SZOPA, S., VAN DER WERF, G.R., VOULGARAKIS, A., WEELE, M., WEISS, R.F., WILLIAMS, J.E., ZENG, G. **Three decades of global methane sources and sinks.** Nature Geoscience, v.6: 813-823, 2013.
- [22] MARANI, L.; **Estudo da emissão de metano no pantanal sul-matogrossense.** Tese de Doutorado. INPE, São José dos Campos/SP, 2007.
- [23] MARCHUK, G.I., **Mathematical models in environmental problems: Studies in mathematical and its applications.** North-Holland, Amsterdam, 1986.
- [24] MALHI, Y.; MEIR, P.; BROW, S. **Forestes, carbon and global climate.** Philosophical Transactions Royal Society Lond. A, 360, 1567-1591, 2002.
- [25] MEDEIROS, L.A. and RIVERA, P.H. **Espaços de Sobolev e Equações Diferenciais Parciais.** Textos de Métodos Matemáticos, UFRJ, Rio de Janeiro/RJ 1975.
- [26] MENEZES, E.M. **Modelagem e simulação da dispersão do metano no reservatório de Santo Antonio - Rondônia.** Tese de Doutorado, PPGFA-UFMT, Cuiabá/MT 2017.
- [27] MEYER, J.F.C.A. e DINIZ, G.L. **Pollutant dispersion in wetland systems: mathematical modeling and numerical simulation.** Ecological Modelling, 200,p.360-370, 2007.
- [28] MISTRO, D.C. **O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação.** Dissertação de Mestrado, IMEEC-UNICAMP, Campinas/SP, 1992.
- [29] MOREIRA, J.C.; WROBEL, L.C. **Um modelo de elementos finitos para análise de dispersão,** relatório interno COPPE-UFRJ/RJ, 1983.

- [30] ODI, N.L.G. **Estudo de fluxos superficiais de vapor d'água na área da represa do Rio Manso/MT: Modelagem e simulações**. Dissertação de mestrado, PPGFA–UFMT, 2005.
- [31] OKUBO, A., **Diffusion and ecological problems: Mathematical models**. Springer, Berlin, 1980.
- [32] PASQUILL, F., **Atmospheric Diffusion**, John Wiley & Sons, New York, 2 edition, 1974.
- [33] PINTO, A.G.G., **Desmistificando o metano** Revista Cidadania e meio Ambiente, 2011. Disponível em: <<https://www.ecodebate.com.br/2011/10/06/desmistificando-o-metano-artigo-de-antonio-germano-gomes-pinto/>>. Acesso em 2 de janeiro de 2018.
- [34] POLETTI, E.C.C., **Dispersão de poluente em sistema de reservatório: modelagem matemática e simulação computacional utilizando-se aproximação numérica e conjuntos fuzzy** Tese de Doutorado, FEEC–UNICAMP, Campinas/SP 2009.
- [35] SANTOS, E. O. **Contabilização das emissões Líquidas de Gases de Efeito Estufa de Hidrelétricas: Uma Análise Comparativa entre Ambientes Naturais e Reservatórios Hidrelétricos**. Tese de Doutorado, COPPE–UFRJ, Rio de Janeiro/RJ 2006.
- [36] SCHIMIDT, G. **Methane: A Scientific Journey from Obscurity to Climate Super-Stardom**. NAA GISS Research Features, 2004. Disponível em: <http://www.giss.nasa.gov/research/features/200409_methane/>. Acesso em 23 de abril de 2016.
- [37] SILVA, J.S.; ABDON, M.M. **Delimitações do Pantanal Brasileiro e suas Subregiões**. Revista Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, v.33, n. Especial, 1703-1711, 1998.

- [38] TOLENTINO, M., ROCHA-FILHO, R.C., **A Química no Efeito Estufa**, Revista Química Nova na Escola, n.8, 10-14, 1998.
- [39] WWF - World World Wide Fund for Nature. Disponível em: <<http://www.wwf.org.br>>. Acesso em 15 de maio de 2016.
- [40] ROCHA, B. N.; BRANCO, K. S., PEREIRA, L., CASTELO BRANCO, M., **Caderno: Mudança global do clima** Iniciativa Verde, São Paulo/SP, 2014. Disponível em: <<http://http://www.terrabrasilis.org.br/ecotecadigital/images/abook/pdf/1sem2015/junho/Jun.15.11.pdf>>. Acesso em 17 de maio de 2016.

Apêndice A

Apêndices

A.1 Conceitos e definições

Seja $\Omega \in \mathbb{R}^2$, $C^m(\Omega)$ é o conjunto das funções u tais que u e todas as suas derivadas parciais de ordem menor ou igual a m são contínuas $\forall(x, y) \in \Omega$. Se u possui infinitas derivadas contínuas, $\forall(x, y) \in \Omega$, dizemos que $u \in C^\infty(\Omega)$.

Com o intuito de incluir algumas condições de fronteira na definição de classes de funções, definimos o espaço $C_0^\infty(\Omega)$ como um subespaço de $C^\infty(\Omega)$ que consiste em todas as funções $u \in C^\infty(\Omega)$ tais que u e todas as suas derivadas se anulam na fronteira de Ω .

Seja $D(\Omega)$ o espaço de todas as funções de $C^\infty(\Omega)$, $\Phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, com suporte compacto em Ω . Considerando u uma função continuamente derivável em Ω no sentido clássico, então, para $\varphi \in D(\Omega)$, e integrando-se por partes, tem-se:

$$\int_{\Omega} u' \varphi d\mu = u\varphi|_{\Omega} - \int_{\Omega} u\varphi' d\mu = - \int_{\Omega} u\varphi' d\mu.$$

Esta igualdade motivou a definição de derivada de uma distribuição formulada por Sobolev (1936) e Schwartz (1945) conhecida como derivada fraca ou derivada no sentido das distribuições.

Seja $\mathcal{L}^2(\Omega)$ o espaço das funções u que são de quadrado integráveis, no sentido

de Lebesgue, sobre Ω , ou seja:

$$\mathcal{L}^2(\Omega) = \{u : \iint_{\Omega} |u(x, y)|^2 d\mu < \infty\}.$$

Sendo $u \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ uma distribuição sobre Ω , u possui derivadas de todas as ordens no sentido das distribuições, entretanto, não se pode afirmar que essas derivadas no sentido das distribuições também pertençam a $\mathcal{L}^2(\Omega)$.

Uma função $v = v(x, y)$ pertence ao espaço de Sobolev $H^m(\Omega)$ se v e todas as suas derivadas parciais de ordem menor ou igual a m pertencem a $\mathcal{L}^2(\Omega)$.

No problema abordado, é necessário funções que pertençam a $\mathcal{L}^2(\Omega)$, cujas primeiras derivadas também pertençam a $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Assim, o espaço $H^1(\Omega)$ será:

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

Assim, tomando um subespaço conveniente de $H^1(\Omega)$ busca-se as funções teste, com as quais será construída a solução aproximada do problema.

A.2 Cálculos dos Produtos Internos

Pela transformação T dada na seção 3.2 se tem:

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) &= x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta \\ y(\xi, \eta) &= y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta \end{aligned}$$

e

$$\varphi_i(\xi, \eta) = \varphi(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$$

assim:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} &= \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} &= \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{aligned}$$

e substituindo as derivadas de x e y tem-se, na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & y_2 - y_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \end{pmatrix}$$

e então:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix}$$

com $M = (m_{ij}) = (T^t)^{-1}$. Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} &= \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} &= \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e calculando os produtos internos utilizando as mudanças de variáveis, se chega a

$$P_1 = (\varphi_i, \varphi_j)_{0, \Omega_e} = \iint_{\Omega_e} \varphi_i \cdot \varphi_j dx dy = \iint_{\hat{\Omega}_e} \varphi_i \cdot \varphi_j |det T| d\eta d\xi = |det T| (\varphi_i, \varphi_j)_{0, \hat{\Omega}_e} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} P_2 &= \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right)_{0, \Omega_e} = \int \int_{\Omega_e} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx dy = \\ &= \iint_{\hat{\Omega}_e} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \end{pmatrix} |det T| d\eta d\xi = \\ &= |det T| \iint_{\hat{\Omega}_e} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{12} \end{pmatrix} d\eta d\xi = \\ &= |det T| \iint_{\hat{\Omega}_e} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{12} \end{pmatrix} d\eta d\xi = \\ &= |det T| \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{12} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

de modo análogo:

$$\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right)_{\Omega_e} = |det T| \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{21} \\ m_{22} \end{pmatrix}$$

e chamando $P = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} & \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix}$ tem se:

$$\begin{aligned} (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j)_{0, \Omega_e} &= \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right)_{\Omega_e} + \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right)_{\Omega_e} = \\ &= |\det T| \left(\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \cdot P \cdot \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix}^t + \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \cdot P \cdot \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} P_3 &= \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \varphi_j \right)_{\Omega} = \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \cdot \varphi_j dx dy = \iint_{\hat{\Omega}_e} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} \cdot \varphi_j |\det T| d\xi d\eta = \\ &= |\det T| \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e de modo análogo:

$$\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}, \varphi_j \right)_{\Omega} = |\det T| \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix}$$

Então, se obtém:

$$(\vec{\nabla} \cdot \nabla \varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_e} = \vec{v} |\det T| [\cos \theta \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}] \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$P_4 = (f, \varphi_i)_{\Omega_e} = \int \int_{\Omega_e} f \cdot \varphi_i dx dy = \int \int_{\hat{\Omega}_e} f \cdot \varphi_i |\det T| d\eta d\xi = |\det T| f(1, \varphi_i)_{\hat{\Omega}_e} \quad (\text{A.4})$$

E para as integrais de fronteira, se tem

$$\varphi_1(\xi) = 1 - \xi$$

$$\varphi_2(\xi) = \xi$$

$$\varphi_3(\xi) = 0$$

assim,

$$x(\xi) = x_1 + (x_2 - x_1)\xi$$

$$y(\xi) = y_1 + (y_2 - y_1)\xi$$

e então, para $k = 1, 2$:

$$P_5 = \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_k} = \int_{\Gamma_k} \varphi_i \cdot \varphi_j dx = \int_0^1 \varphi_i \cdot \varphi_j T_1 d\xi = T_1 \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\hat{\Gamma}_k} \quad (\text{A.5})$$

em que $T_1 = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$

E calculando as integrais sobre os elementos de referência, se obtém

$$((\varphi_i, \varphi_j)_{\hat{\Omega}_e})_{\hat{i}\hat{j}} = \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \begin{pmatrix} 1 - \xi - \eta \\ \xi \\ \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \xi - \eta & \xi & \eta \end{pmatrix} d\eta d\xi =$$

$$\int_0^1 \int_0^{1-\xi} \begin{pmatrix} (1 - \xi - \eta)^2 & \xi(1 - \xi - \eta) & \eta(1 - \xi - \eta) \\ \xi(1 - \xi - \eta) & \xi^2 & \xi\eta \\ \eta(1 - \xi - \eta) & \xi\eta & \eta^2 \end{pmatrix} d\eta d\xi =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{12} \end{pmatrix}$$

No calculo acima, onde as integrais são calculadas em cada elemento

da matriz, comete-se um abuso de notação, afim de simplificá-la. Da mesma maneira calculamos os demais produtos internos, e teremos:

$$\left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \left(\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}, \varphi_j \right)_{\hat{\Omega}_e} \right)_{\hat{i}\hat{j}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

$$\left((1, \varphi_i)_{\hat{\Omega}_e} \right)_i = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \end{pmatrix}, \quad \left(\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\hat{\Omega}_e} \right)_i = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Essas são as chamadas submatrizes de rigidez.

Apêndice B

Códigos Computacionais

```
1 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
2 %                                PARÂMETROS                                %
3 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
4 clear all; t0=cputime; %format long;
5 %
6 %      parâmetros do modelo
7 %
8 a  = 0.0012;                    % coeficiente difusivo
9 sig = 1.5e-2;                   % coeficiente de degradação
10 V  = 2.0;                       % velocidade do vento (km/h)
11 tet = pi/4;                      % direção do vento
12 q  = 0.018;                      % fonte de metano media em cada nó
13 Ap = (0.032-0.004);              % amplitude da fonte de metano
14 w  = pi/12;                      % ciclo diário para variação da fonte
15 b  = 0.01;                       % permeabilidade em Gama 0 e 3
16 %
17 %      malha do dominio (gerada pelo gmsh)
18 %
19 load dadosfer3;                 % carregando dados da discretizacao
20 ntr = length(malha2fer);         % calculo do n° de elementos da malha
21 ntn = length(coord2fer);         % calculo do n° de nós da malha
22 dis = 10.968;                   % distancia real medida
23 dr  = 289.103;                   % distancia calculada Gmesh
24 coord2fer = (dis/dr)*coord2fer; % mudança das coordenadas distancia real
```

```

25 dias = 20; % tempo final em dias
26 tfinal= 24*dias; % atribuição do instante final (horas)
27 itmax = 40000; % n° máximo de iterações no tempo
28 xmax = max(coord2fer(:,1)); % cálculo do valor máximo no eixo x
29 ymax = max(coord2fer(:,2)); % cálculo do valor máximo no eixo y
30 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
31 %
32 % calculo dos parâmetros da discretizacao
33 %
34 dt = tfinal/itmax;
35 mdt = dt/2;
36 %
37 % preparacao dos parâmetros que independem das coordenadas
38 %
39 c1 = mdt*sig; % coef. aux (fi-i | fi-j)
40 c2 = mdt*a; % coef. (grad fi-i | grad fi-j)
41 Vx = mdt*V*cos(tet); % coef. (d fi-i/dx | fi-j)
42 Vy = mdt*V*sin(tet); % coef. (d fi-i/dy | fi-j)
43 stm=(1+c1); % coef. a esq (fi-i | fi-j)
44 stn=(1-c1); % coef. a dir (fi-i | fi-j)
45 %
46 % submatrizes de rigidez
47 %
48 % (fi-j)*(fi-i)
49 %
50 mfi=[1/12 1/24 1/24; 1/24 1/12 1/24; 1/24 1/24 1/12];
51 %
52 % submatrizes nas fronteiras Gama 1 e Gama 2
53 %
54 mfo=[1/3 1/6; 1/6 1/3];
55 %
56 % montagem das matrizes do sistema
57 %
58 A = sparse(ntn,ntn);
59 B = sparse(ntn,ntn);
60 d = zeros(ntn,1);

```

```

61 c = zeros(ntn,1);
62 x=zeros(3);
63 y=x;
64 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
65 tt=cputime;
66 for itr=1:ntr
67     for il=1:3
68         ig = malha2fer(itr,il);
69         x(il)=coord2fer(ig,1);
70         y(il)=coord2fer(ig,2);
71     end
72     jac = det([(x(2)-x(1)) (x(3)-x(1));(y(2)-y(1)) (y(3)-y(1))]);
73     s    = abs(jac);
74 %
75 % calculo das entradas p\ submatrizes restantes
76 %
77     dfdx(1)=y(2)-y(3); dfdy(1)=x(3)-x(2);
78     dfdx(2)=y(3)-y(1); dfdy(2)=x(1)-x(3);
79     dfdx(3)=y(1)-y(2); dfdy(3)=x(2)-x(1);
80 %
81 % Obtendo a submatriz de rigidez para (grad fi_i | grad fi_j)
82 %
83     gra1 = [(dfdx(1)^2) (dfdx(1)*dfdx(2)) (dfdx(1)*dfdx(3));...
84 ... (dfdx(2)*dfdx(1)) (dfdx(2)^2) (dfdx(2)*dfdx(3));...
85 ... (dfdx(3)*dfdx(1)) (dfdx(3)*dfdx(2)) (dfdx(3)^2)];
86     gra2 = [(dfdy(1)^2) (dfdy(1)*dfdy(2)) (dfdy(1)*dfdy(3));...
87 ... (dfdy(2)*dfdy(1)) (dfdy(2)^2) (dfdy(2)*dfdy(3));...
88 ... (dfdy(3)*dfdy(1)) (dfdy(3)*dfdy(2)) (dfdy(3)^2)];
89     mgf = gra1 + gra2;
90 %
91 % Obtendo a submatriz de rigidez para (d fi-j/dx | fi-i)
92 %
93     mdx = [dfdx(1) dfdx(2) dfdx(3);dfdx(1) dfdx(2)...
94 ... dfdx(3);dfdx(1) dfdx(2) dfdx(3)];
95 %
96 % Obtendo a submatriz de rigidez para (d fi-j/dy | fi-i)

```

```

97 %
98     mdy = [dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3);dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3);...
99 ...dfdy(1) dfdy(2) dfdy(3)];
100 %
101     for il=1:3
102         ig = malha2fer(itr,il);
103         for jl=1:3
104             jg = malha2fer(itr,jl);
105             soma =(c2/s)*mgf(il,jl) + (Vx*mdx(il,jl) +...
106                 ... Vy*mdy(il,jl))*s*mdt/(6*jac);
107             A(ig,jg) = A(ig,jg)+stm*s*mfi(il,jl)+soma;
108             B(ig,jg) = B(ig,jg)+stn*s*mfi(il,jl)-soma;
109         end
110     end
111 end
112 %
113 %     Condicao inicial (distribuição de metano sobre o domínio em t = 0)
114 %
115     for ii=4160:ntr
116         ig1 = malha2fer(ii,1);
117         ig2 = malha2fer(ii,2);
118         ig3 = malha2fer(ii,3);
119         c(ig1) = q;
120         c(ig2) = q;
121         c(ig3) = q;
122     end
123 %
124 %     Resolucao iterativa do sistema
125 %
126 p1=zeros(itmax,1);
127 p2=zeros(itmax,1);
128 p3=zeros(itmax,1);
129 p4=zeros(itmax,1);
130 it = 0;
131 %
132 %     criando os arquivos para as animações

```

```

133 %
134     figure(1)
135     subplot(2,2,1)
136     trisurf(malha2fer,coord2fer(:,1),coord2fer(:,2),c),view(0,90),...
137 ...set(gca,'CLim', [0, 13]),colorbar,shading interp,ylabel('y (km)'),...
138 ...xlabel('x (km)'),title('t = 0 dias');%,set(gcf,'renderer','painters');
139 %
140 t=0;
141 for it = 1:itmax
142     p1(it)=c(111);
143     p2(it)=c(686);
144     p3(it)=c(2001);
145     p4(it)=c(4537);
146 %
147 %     Entrada/Saida nas fronteiras Gama 0 e 3
148 %
149     ntf = length(front2fer);
150     for itr1f=front2fer(1):front2fer(ntf);
151         for il=1:2;
152             ig = front2fer(itr1f);
153             x(il)=coord2fer(ig,1);
154             y(il)=coord2fer(ig,2);
155         end
156         jac2 = sqrt((x(2)-x(1))*(x(2)-x(1))+(y(2)-y(1))*(y(2)-y(1)));
157         for il=1:2;
158             ig = front2fer(itr1f);
159             for jl=1:2;
160                 s0 = mdt*jac2*b*mfo(il,jl);
161             end
162             d(ig) = d(ig)+s0;
163         end
164     end
165 %
166 % atualizando a fonte em d para os nós na agua
167 %
168     for ii=4160:ntr

```

```

169         ig1 = malha2fer(ii,1);
170         ig2 = malha2fer(ii,2);
171         ig3 = malha2fer(ii,3);
172         d(ig1) = dt*(q+(Ap/2)*cos(w*t));
173         d(ig2) = d(ig1);
174         d(ig3) = d(ig1);
175     end
176     %
177     %         Efetuando as operações do lado direito
178     %
179     dir=B*c + d;
180     %
181     %         Resolvendo o sistema linear e atualizando valores
182     %
183     c=A\dir;
184     t = t + dt;
185     if it==16000
186         subplot(2,2,2)
187         trisurf(malha2fer,coord2fer(:,1),coord2fer(:,2),c),...
188             ...view(0,90),set(gca,'CLim', [0, 13]),colorbar,...
189             ...shading interp,ylabel('y (km)'),xlabel('x (km)'),...
190             ...title('t = 8 dias'),set(gcf,'renderer','painters');
191     end
192     if it==30000
193         subplot(2,2,3)
194         trisurf(malha2fer,coord2fer(:,1),coord2fer(:,2),c),...
195             ...view(0,90),set(gca,'CLim', [0, 13]),colorbar,...
196             ...shading interp,ylabel('y (km)'),xlabel('x (km)'),...
197             ...title('t = 15 dias'),set(gcf,'renderer','painters');
198     end
199     if it==40000
200         subplot(2,2,4)
201         trisurf(malha2fer,coord2fer(:,1),coord2fer(:,2),c),...
202             ...view(0,90),set(gca,'CLim', [0, 13]),colorbar,...
203             ...shading interp,ylabel('y (km)'),xlabel('x (km)'),...
204             ...title('t = 20 dias'),set(gcf,'renderer','painters');

```

```

205     end
206 end
207 %
208 % Salvando os gráficos para 4 instantes de tempo
209 %
210 saveas(gcf,'result1/img_4tempos.fig');
211 %
212 % Gerando os graficos para 4 nos
213 %
214 cmax1 = max(p1);
215 cmax2 = max(p2);
216 cmax3 = max(p3);
217 cmax4 = max(p4);
218 cmax = max([cmax1 cmax2 cmax3 cmax4]);
219 del    = dias/40000;
220 dd     = [0:del:dias-del];
221 figure(2)
222 subplot(2,2,1)
223 plot(dd,p1),title('Nó 111'),ylabel('Concentracao(mol/km^2)'),...
224 ...xlabel('dias'),grid on, axis([0 dias 0 cmax]);
225 subplot(2,2,2)
226 plot(dd,p2),title('Nó 686'),ylabel('Concentracao(mol/km^2)'),...
227 ...xlabel('dias'),grid on, axis([0 dias 0 cmax]);
228 subplot(2,2,3)
229 plot(dd,p3),title('Nó 2001'),ylabel('Concentracao(mol/km^2)'),...
230 ...xlabel('dias'),grid on, axis([0 dias 0 cmax]);
231 subplot(2,2,4)
232 plot(dd,p4),title('Nó 4537'),ylabel('Concentracao(mol/km^2)'),...
233 ...xlabel('dias'),grid on, axis([0 dias 0 cmax]);
234 saveas(gcf,'result1/img_4nos.fig');
235 %
236 % Calculando tempo total de processamento
237 %
238 e=cputime-tt;
239 disp('tempo = ');
240 disp(e)

```