



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

**DISPERSÃO DE NITROGÊNIO SINTÉTICO EM
ÁREA DE TRANSIÇÃO FLORESTA-CERRADO:
MODELAGEM E SIMULAÇÕES**

OSVALDO DIAS DE MORAES

ORIENTADOR: PROF. DR. GERALDO LÚCIO DINIZ

Cuiabá, MT, Fevereiro 2009



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

**DISPERSÃO DE NITROGÊNIO SINTÉTICO EM
ÁREA DE TRANSIÇÃO FLORESTA-CERRADO:
MODELAGEM E SIMULAÇÕES**

OSVALDO DIAS DE MORAES

*Dissertação apresentada ao Programa
de Pós-graduação em Física Ambiental
da Universidade Federal de Mato
Grosso, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Física
Ambiental.*

ORIENTADOR: PROF. DR. GERALDO LÚCIO DINIZ

Cuiabá, MT, Fevereiro 2009

DEDICATÓRIA

A Deus pela vida, aos meus pais o início
de tudo, a minha família pelo amor e
compreensão, meus sonhos, a
continuidade.

AGRADECIMENTOS

- Ao professor Dr. Geraldo Lúcio Diniz pelo excelente trabalho de orientação que fez de maneira muito competente, tendo paciência naqueles momentos de desespero e dúvidas, criando condições para que eu elaborasse este trabalho.

- Ao coordenador do programa em física ambiental professor Dr. José de Souza Nogueira e demais professores, muito obrigado

- Aos meus colegas de curso pela amizade, pelo convívio e ensinamentos, em especial à Valdirene, que nos momentos de desespero e angústia soube ser uma grande companheira.

- Aos membros da banca, professores Dr. Laércio Carvalho de Barros e Dr. Shozo Shiraiwa, pela contribuição para a melhoria da qualidade deste trabalho.

- Aos meus filhos, Brenda, Anselmo, Daliany e minha esposa Edinete, pela paciência nos momentos de ausência.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	ii
LISTA DE SÍMBOLOS	iii
RESUMO	iv
ABSTRACT	v
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I	
EMBASAMENTO TEÓRICO	3
1.1 NITROGÊNIO SINTÉTICO	3
1.2 – ÁREA DE ESTUDO	5
1.3 – MODELAGEM MATEMÁTICA	6
CAPÍTULO 2	
MODELO MATEMÁTICO	10
CAPÍTULO 3	
MÉTODO DE APROXIMAÇÃO DA SOLUÇÃO	14
3.1 FORMULAÇÃO VARIACIONAL	14
3.2 EXISTÊNCIA E UNICIDADE DE SOLUÇÃO	17
3.3 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	23
3.4 DISCRETIZAÇÃO DO PROBLEMA	25
3.5 ESTABILIDADE NUMÉRICA	27
CAPÍTULO 4	
RESULTADOS E COMENTÁRIOS	29
4.1 INTRODUÇÃO	29
4.2 SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS	29
4.2.1 Simulação do primeiro cenário	29
4.2.2 Simulação do segundo cenário	30
4.2.3 Simulação do terceiro cenário	31
4.2.4 Simulação do quarto cenário	32
4.2.5 Simulação do quinto cenário	33

4.2.6 Simulação do sexto cenário	34
4.3. COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS	37
CONSIDERAÇÕES FINAIS	37
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	38
APÊNDICE A	
CONCEITOS, DEFINIÇÕES E TEOREMAS	44
1. DESIGUALDADE DE HÖLDER	44
2. IDENTIDADES DE GREEN	44
3. CONCEITOS VARIACIONAIS	44
3.1 DISTRIBUIÇÕES	44
3.2 DIFERENCIABILIDADE DE FUNÇÕES LIPSCHITZ CONTÍNUA	44
3.3 CONVERGÊNCIA FRACA DE MEDIDA E SOLUÇÃO FRACA	44
APÊNDICE B	
1 CÓDIGOS PARA MATLAB	48
2 CÓDIGOS PARA MATHEMATICA®	52

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Localização da área de estudo.....	5
Figura 2: Diagrama do ciclo de nitrogênio.....	7
Figura 3: Definição do domínio aéreo.....	10
Figura 4: Elemento de área e principais fluxos de massa a ele relacionados...	11
Figura 5: Função base $\varphi_i(x_j, y_j)$ definida sobre o j-ésimo nó.....	24
Figura 6 : Triângulos de referência superior (T_s) e inferior (T_i).....	24
Figura 7 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético ao longo do domínio, na estação úmida com vento de sudeste (N° de Peclet = 0,8132).....	29
Figura 8 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250....	29
Figura 9 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético ao longo do domínio, na estação seca/úmida com vento de sudeste (N° de Peclet = 0,6389).....	32
Figura 10 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250..	32
Figura 11 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação seca com vento de sudeste (N° de Peclet = 0.5528).....	33
Figura 12 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.....	33
Figura 13 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação úmida com vento de noroeste (N° de Peclet = 0,7177).	34
Figura 14 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250..	34
Figura 15 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação úmida/seca com vento de noroeste (N° de Peclet = 0,6389).	35
Figura 16 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.....	35
Figura 17 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação seca com vento de noroeste (N° de Peclet = 0,5528).	36
Figura 18 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250..	36

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros da simulação do cenário na estação úmida e vento de sudeste.....	30
---	----

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω	Ômega	Domínio bidimensional
Γ_k	Gama (maiúsculo)	Fronteira k
η	Eta	Vetor normal exterior unitário
α	Alfa	Coefficiente de difusividade efetiva
δ_0	Delta	Operador delta de Dirac
σ	Sigma	Coefficiente de degradação global da substância
φ	Fi	Função base linear
θ	Teta	Ângulo para o sentido do vento predominante
μ	mi	Medida (no sentido de Lebesgue)
u		Concentração de Nitrogênio Sintético
∇		Operador nabla
$\vec{V}$		Campo vetorial de velocidades (termo advectivo)
f		Termo fonte
$N_j^{(i)}$		Nó do j -ésimo vértice do i -ésimo triângulo
t		Tempo (horas)
A		Matriz de rigidez
T_n		Triângulo (n-ésimo)
B		Matriz componente do vetor carga
d		Componente do vetor carga
$\mathcal{V}$		Espaço vetorial
$\mathcal{V}_h$		Sub-espaço vetorial
v		Função teste
L^2		Espaço de Banach (funções de quadrado integrável)
H^1		Espaço de Sobolev

RESUMO

MORAES, O. D. **Dispersão de nitrogênio sintético em área de transição floresta-cerrado: modelagem e simulações**. Cuiabá. MT. 2009. 63f. Dissertação (Mestrado) - Física Ambiental. Universidade Federal de Mato Grosso.

Neste trabalho é apresentado um problema de dispersão de nitrogênio sintético na atmosfera, devido à aplicação de adubos nitrogenados na agricultura, em uma área de transição floresta-cerrado. O objetivo deste trabalho é propor um modelo matemático bidimensional e a simulação de cenários, de modo a descrever o processo de dispersão do nitrogênio sintético na atmosfera, em função dos fenômenos físicos considerados. O modelo foi elaborado a partir de uma equação geral de difusão-advecção-reação, para a qual se obteve a existência e unicidade de solução para o problema em sua formulação variacional. A aproximação numérica foi obtida por métodos computacionais com a discretização espacial através do método dos elementos finitos (MEF), via técnica de Galerkin. Para a discretização temporal, a opção foi pelo método de Crank-Nicolson. O uso das simulações computacionais permitiu a apresentação de cenários, onde foi possível verificar os efeitos da dispersão do nitrogênio sintético na área em estudo, de modo a viabilizar a adoção de estratégias mitigadoras ou de saneamento.

Palavras-chave: Poluição atmosférica, modelagem ambiental, método dos elementos finitos (MEF), simulação computacional.

ABSTRACT

MORAES, O. D. **Dispersion of synthetic nitrogen in the transition area forest-Brazilian savannah: modeling and simulations.** Cuiaba. MT. 2009. 63f. Master's Thesis - Environmental Physics. Federal University at Mato Grosso State.

In this thesis a problem of dispersion for synthetic nitrogen in the atmosphere is presented, of which the origin is due the use of nitrogen fertilizer in agriculturist areas, for a local of transition forest-Brazilian savannah. The purpose of this thesis is to propose a mathematical model to describe the dispersal process of the synthetic nitrogen for a bidimensional domain in the aerial environment and to develop numerical codes in order to simulate scenarios, where it must take into consideration the physical phenomena. The model was elaborated from the diffusion-reaction-advection equation, of which was obtained the existence and uniqueness of solution for the weak formulation for this problem. The numerical approximation was implemented by the finite elements method (FEM), using the Galerkin scheme for the spatial discretization, and the Crank-Nicolson scheme for the time discretization. The use of computational simulations permits to obtain scenarios where is possible to verify the effects of dispersion of synthetic nitrogen into the study area, that to make feasible the adoption of prevention or mitigation strategies.

Keywords: Atmospheric pollution, environmental modelling, the finite element method (FEM), computer simulation.

INTRODUÇÃO

Atualmente, devido ao crescimento populacional e a produção estagnada de alimentos, há a necessidade de maior produção de alimentos em um menor prazo. Em função disto, vem sendo utilizada a aplicação de nitrogênio sintético para aumentar a produção agrícola.

O problema que se vislumbra, diante do aumento da aplicação de adubos nitrogenados, é um desequilíbrio do ciclo de nitrogênio na atmosfera (LIMA, 2007).

No Brasil, grande produtor de alimentos, e em Mato Grosso, uma das grandes fronteiras agrícolas do país, a utilização de nitrogênio sintético é crescente.

Neste sentido, o presente estudo foi realizado para uma área de transição floresta-cerrado próxima ao município de Sinop-MT, por ser a região com maior produção agrícola e onde está situado o sítio experimental do Programa de Pós-graduação de Física Ambiental.

O objetivo geral é propor um modelo matemático que possa descrever o processo de dispersão de nitrogênio sintético em uma área de transição floresta-cerrado.

Os objetivos específicos são: descrever um modelo matemático para a dispersão de nitrogênio sintético em sua formulação clássica; obter a formulação variacional do modelo proposto; demonstrar a existência e unicidade da solução do problema variacional; implementar o código numérico apropriado à formulação variacional obtida em ambiente Matlab® e apresentar cenários, através das simulações obtidas pelo código numérico implementado.

No primeiro capítulo, se fará uma revisão bibliográfica, assim como a descrição da localização e das características da área de estudo. No segundo capítulo,

será proposto um modelo bidimensional que descreve o processo de dispersão de nitrogênio sintético para o fluxo laminar na direção horizontal, a sua formulação clássica, utilizando uma equação de difusão-reação-advecção. No terceiro capítulo, será obtida a formulação variacional para o problema. Este procedimento se justifica para a obtenção da existência e unicidade de solução. Em seguida, é feita a discretização do problema, utilizando métodos computacionais para as discretizações espacial e temporal.

No último capítulo serão apresentados alguns resultados, através da simulação de cenários, com alguns comentários sobre os cenários obtidos.

CAPÍTULO I

EMBASAMENTO TEÓRICO

1.1 NITROGÊNIO SINTÉTICO

A comunidade científica internacional começa a alertar para as graves consequências da radical modificação no ciclo do nitrogênio, nos últimos 40 anos, após o advento dos fertilizantes sintéticos (CASTRO, 2007).

O nitrogênio é indispensável à fotossíntese, é integrante das proteínas vegetais, auxilia a formação das folhagens e favorece o rápido crescimento das plantas. Ainda na década de 60, a disponibilidade de nitrogênio era controlada por processos naturais, por meio da fixação deste elemento pelas plantas (MARTINELLI, 2007).

O aumento das adições de fertilizantes nitrogenados sintéticos aos solos agrícolas tem sido indicado como principal responsável pela crescente emissão de óxido nitroso (N_2O) para a atmosfera.

O óxido nitroso é um dos gases envolvidos no processo de aquecimento global. Apresenta uma vida útil na atmosfera estimada em 120 anos (IPCC, 1995). O potencial de aquecimento global de cada molécula de N_2O , num horizonte de cem anos, é maior (310 vezes) do que o de cada molécula de CO_2 . Embora o N_2O seja um gás reativo, ele contribui pouco para esse processo de aquecimento global, em decorrência de sua baixa concentração na atmosfera (PAUL e CLARCK, 1996).

Os estudos demonstraram que a concentração atmosférica desse gás vem aumentando consideravelmente nas últimas décadas, e continua a aumentar anualmente a uma taxa de 0,25% (KAISER et al. 1998).

O nitrogênio é fundamental na produção de alimentos por se tratar de um nutriente limitante. Na sua ausência, não se consegue produzir alimentos nos níveis da demanda atual. Por outro lado, seu uso excessivo não permite a absorção completa

pelas plantas e se torna um poluente. “O nitrogênio tem extrema mobilidade, muda rapidamente de estado e vai da terra para o ar e dali para a água com muita facilidade, contaminando os ecossistemas agrícolas e penetrando nos lençóis freáticos” (MARTINELLI, 2007).

Os processos bióticos do solo contribuem com aproximadamente 90% da produção global de N_2O (PAUL e CLARCK, 1996).

As emissões de N_2O dos solos ocorrem como consequência, sobretudo, de processos microbiológicos a partir do nitrogênio mineral. A desnitrificação consiste na redução microbiana do nitrato (NO_3), em ambientes anaeróbico, a formas intermediárias de N e, então, a formas gasosas (NO , N_2O e N_2) que são normalmente perdidas para a atmosfera. O processo de desnitrificação, geralmente, é considerado como o de maior importância na emissão de óxido nitroso, especialmente onde perdas relativamente grandes de nitrogênio gasoso podem ser medidas.

Embora se acredite que o processo de desnitrificação seja a mais importante etapa do ciclo do nitrogênio, responsável pela emissão do óxido nitroso (NO), o processo de nitrificação sob certas circunstâncias, parece ter uma importância relativamente maior (SKIBA et al., 1993). No caso da nitrificação, os microorganismos oxidantes da amônia utilizariam o nitrito (NO_2) comoceptor final de elétrons, para minimizar a acumulação intracelular de níveis tóxicos de nitrito (RITCHIE e NICHOLAS, 1972).

Medições *in situ* de emissões de N_2O , sob diferentes tipos de solos e sistemas de cultivo, são ainda necessárias para se obter estimativas globais mais precisas (KAISER et al., 1998).

De acordo com a metodologia do (IPCC, 1997), as seguintes fontes de N_2O devem ser consideradas: (1) emissões diretas a partir de solos agrícolas; (2) emissões diretas do solo a partir dos dejetos de animais em pastagens; (3) emissões indiretamente induzidas pelas atividades agrícolas; (4) emissões de sistemas de manejo de dejetos de animais; e (5) emissões de tratamento de dejetos humanos.

Avaliações das emissões de óxido nitroso ainda são raras no Brasil. Faz-se necessário, pois, incrementar estudos visando às medições de fluxo de N_2O sob diferentes sistemas de manejo de solo, assim como condições climáticas e pedológicas.

No estudo de fluxos de nutrientes se faz necessário uma modelagem ambiental, com uma abordagem geral da tendência e enfoques atuais em torno dos impactos ambientais.

1.2 – ÁREA DE ESTUDO

A escolha desta área foi devido ser a região a maior produtora agrícola do Estado de Mato Grosso e onde está situado o sítio experimental do programa de pós graduação de Física ambiental.

A área de estudo está situada na Fazenda Maracaí, localizada, aproximadamente, a 50 km NE de Sinop, Mato Grosso, Brasil ($11^{\circ}24,75'S$; $55^{\circ}19,50'O$) e a 423 m acima do nível do mar. Esta área é constituída por uma floresta tropical de transição, que ocupa o ecótono¹ entre a floresta Amazônica e o Cerrado. O relevo é plano com pequenas ondulações, o clima é tropical com temperatura média de $24^{\circ}C$ (PINTO Jr., 2007).

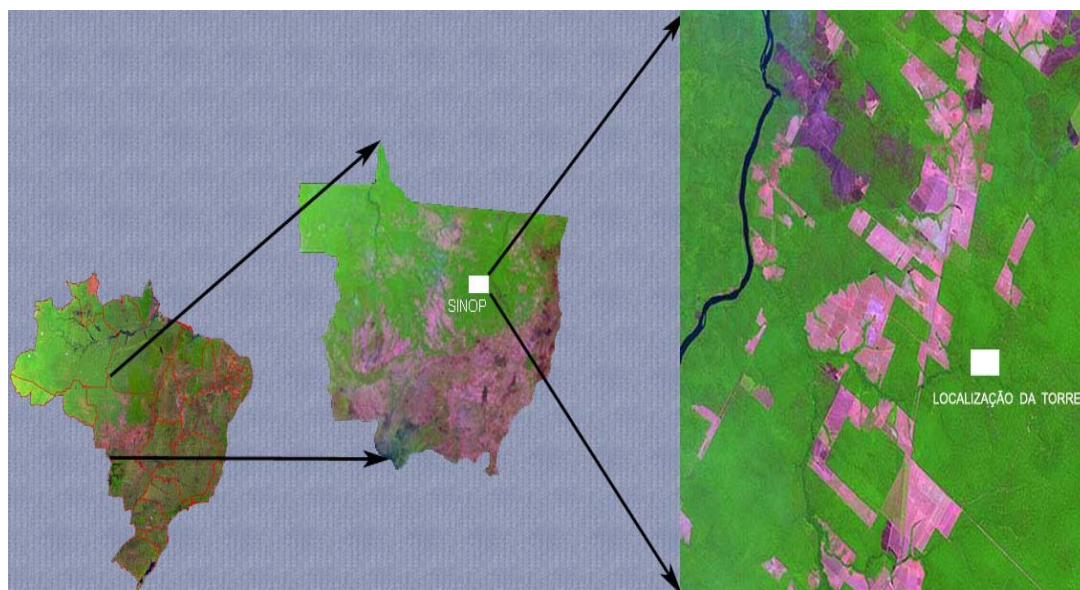


Figura 1 – Localização da área de estudo.

Fonte: Embrapa, 2009.

¹ Ecótono = É a região de transição entre dois ecossistemas

1.3 – MODELAGEM MATEMÁTICA

Pode-se dizer que as ciências naturais como a física, a astrofísica e a química, já estejam hoje, amplamente, matematizadas em seus aspectos teóricos. Nesta área, a matemática tem servido de base para modelar, como por exemplo, os mecanismos que influem na dinâmica de populações, na epidemiologia, na ecologia, na neurologia, na genética e nos processos fisiológicos (BASSANEZI, 2006).

Para BASSANEZI (2006), modelar é selecionar, no sistema, argumentos ou parâmetros considerados essenciais e formalizá-los através de um sistema artificial sobre uma porção da realidade, na tentativa de explicar, de entender, ou de agir sobre ela.

Conforme CHORLEY e HAGETT (1975), modelo é qualquer representação simplificada da realidade ou de um aspecto do mundo real, que tenha interesse para o pesquisador, e que possibilita reconstruir a realidade, prever um comportamento, uma transformação ou uma evolução. Outra definição é a apresentada pelo enunciado de BERRY (1995), que afirma: “um modelo é uma representação da realidade sob uma forma material (representação tangível) ou uma forma simbólica (representação abstrata)”.

No contexto dos sistemas ambientais, há relevância para os fluxos de nutrientes nos ecossistemas. Eles correspondem aos fluxos de componentes nutritivos para as comunidades de plantas e animais, ocorrendo nas mais diversas grandezas de escalas espaciais e temporais. Os fluxos mais significativos são representados pelo ciclo do carbono, ciclo do nitrogênio e ciclo do enxofre. A figura 2, a seguir, é um modelo exemplificando o ciclo do nitrogênio de acordo com CHRISTOFOLETTI (1999).

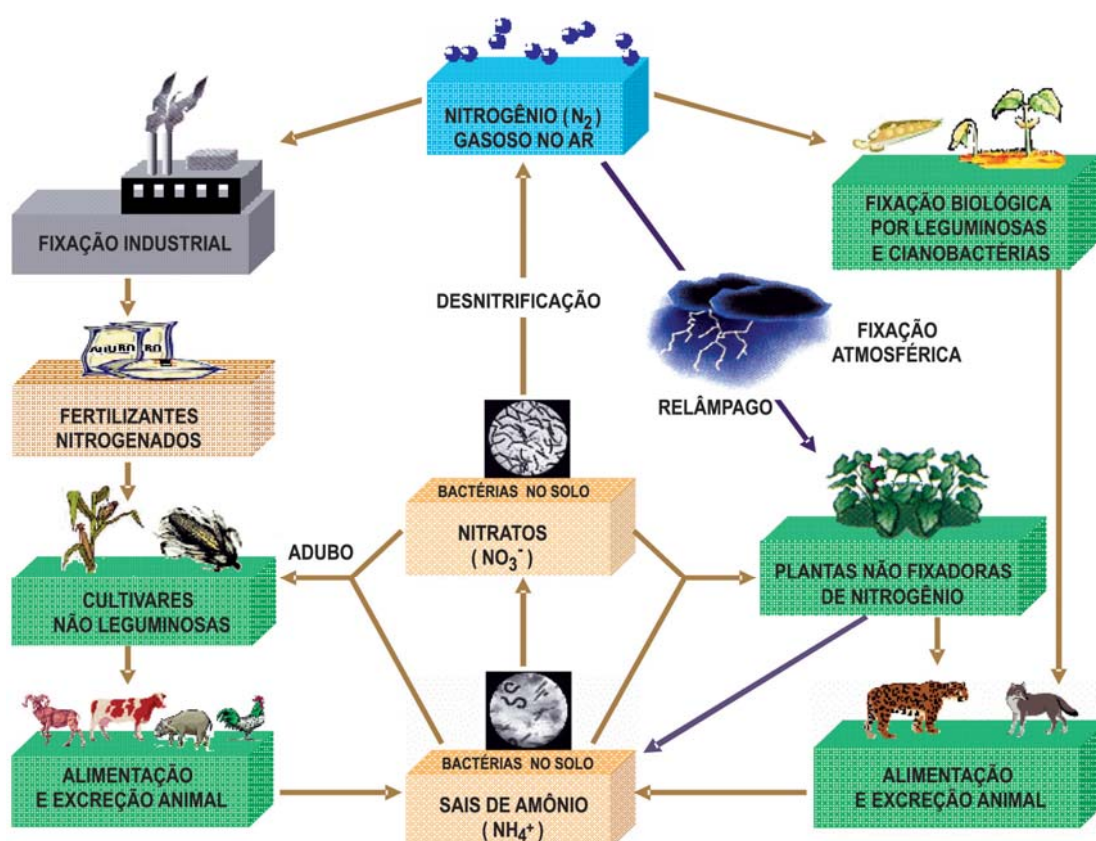


Figura 2: Diagrama do ciclo de nitrogênio.

Os modelos matemáticos são abstrações, no sentido de substituir objetos, forças, eventos, etc. por uma expressão que contém variáveis, parâmetros e constantes matemáticas (KRUMBEIN e GRAIBYLL, 1965).

HAINES-YOUNG e PETCH (1986) procuram salientar outra definição sobre modelos, considerando a funcionalidade para a atividade científica, mostrando que é o mecanismo pelo qual as premissas são usadas para possibilitar conclusões. Em função dessa logicidade interna, estes autores mostram que “os modelos são instrumentos usados para elaborar predições”. A tipologia proposta baseia-se nos critérios de como são construídos e utilizados nos testes sobre hipóteses, considerando três aspectos:

- Se o modelo é determinístico ou estocástico;
- Se o modelo é parcial ou plenamente especificado;
- Se o modelo é “hardware”² ou “software”³.

² Hardware = experimental

³ Software = simulação

A modelagem é eficiente, a partir do momento em que se tem consciência que se está sempre trabalhando com aproximações da realidade, ou seja, que se está elaborando representações de um sistema ou de parte dele (BASSANEZI, 2006).

Segundo CHRISTOFOLETTI (1999), a modelagem pode ser considerada como um instrumento entre os procedimentos metodológicos da pesquisa científica. A justificativa reside no fato de que a construção de modelos para os sistemas ambientais representa a expressão de uma hipótese científica, que necessita ser avaliada, como um enunciado teórico sobre o sistema ambiental focalizado. Sob essa perspectiva, a construção de modelos pode ser considerada como sendo um procedimento inerente à pesquisa científica e a sua elaboração deve ser realizada acompanhando os critérios e normas da metodologia científica.

A modelagem matemática é um processo dinâmico utilizado para obtenção e validação de modelos matemáticos. É uma forma de abstração e generalização com a finalidade de previsão de tendências. A modelagem matemática consiste, essencialmente, na arte de transformar situações da realidade em problemas matemáticos, cujas soluções devem ser interpretadas na linguagem usual (BASSANEZI, 2006).

BORREGO e MIRANDA (2005) e REVORA (1987) alertam para o risco de se considerar os modelos de simulação como a verdadeira representação da realidade. Na verdade, os modelos serão sempre incompletos, uma vez que a realidade envolve sempre dados qualitativos, não passíveis de serem quantificáveis e que são tão importantes quanto os dados mensuráveis. Os modelos sempre serão uma forma de representar a realidade e poderá acontecer que a estruturação da realidade, feita pelo modelo, não seja representativa dela.

Quanto à formulação dos modelos, (JØRGENSEM et al., 1998), afirma que um modelo consiste de cinco componentes, a saber: as funções de força ou variáveis externas que influenciam as condições do ecossistema; as variáveis de estado; as equações para a representação dos processos biológicos, químicos e físicos que ocorrem dentro do ecossistema; os parâmetros ou coeficientes e, finalmente, o modelo ou diagrama conceitual.

Segundo ODI (2005), a modelagem em dinâmica de sistemas não se detém na obtenção de variáveis numéricas precisas em anos especificados. A preocupação

primordial está em identificar as tendências dinâmicas gerais do sistema, se é estável ou não, se oscila, se está em crescimento ou declínio.

O estudo do funcionamento da modelagem matemática e simulação numérico-computacional podem ser vistos no trabalho de DINIZ (2003), entre outros, que descreve um problema de dispersão de poluente num sistema ar-água. A modelagem matemática está permitindo o estudo de diversos fenômenos relacionados à qualidade do ar. Foi usada para analisar o ponto de alcance das emissões aéreas, oriundas de chaminés de indústrias (HEIN e BONA, 2004), com a aplicação de equações de difusão unidimensional no estudo de diferentes características das emissões.

No capítulo seguinte, será apresentado o modelo matemático proposto para descrever o processo de dispersão atmosférica do nitrogênio sintético para a área de estudo apresentada anteriormente.

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO

Para descrever o processo de dispersão atmosférica do nitrogênio sintético na área de estudo apresentada, é importante saber qual o modelo matemático que mais se ajusta ao processo real que ocorre na natureza. O intuito é propor um modelo matemático que possa simular o transporte e a difusão de nitrogênio sintético na atmosfera. Este modelo será analisado, a partir de algumas considerações sobre a dinâmica atmosférica, levando em conta os fenômenos relativos à dinâmica ambiental.

Inicialmente, nesta primeira abordagem, será proposta a adoção de um domínio bidimensional, supondo que o nitrogênio sintético não atinge grandes altitudes, e será considerado o processo de dispersão apenas no plano horizontal, o que facilita o estudo nesta abordagem inicial. Além disso, o processo difusivo pode ser considerado homogêneo a cada camada de 100 m de altitude. Daí, considerando as dimensões da área de estudo, que seria de 1000 km de latitude, por 1000 km de longitude e 100 m de altitude, a partir da superfície, se justifica a adoção de um plano horizontal (domínio bidimensional), conforme apresentado na figura 3.

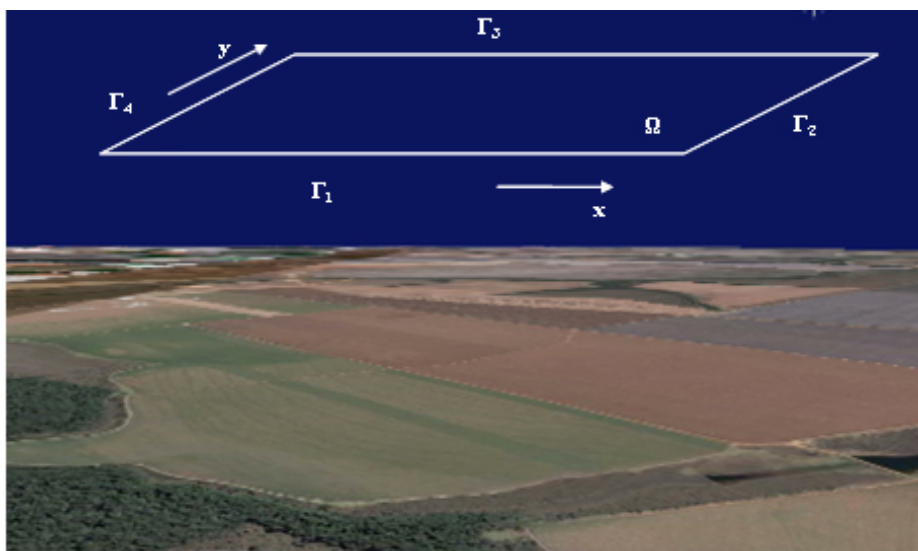


Figura 3: Definição do domínio aéreo.

O plano bidimensional utilizado (ver figura 3), no qual será definido o processo descrito pelo modelo para o processo de dispersão, para o comportamento evolutivo da concentração de um conjunto de partículas de nitrogênio sintético, transportadas nesta área do domínio escolhido, onde serão considerados os fenômenos do processo difusivo (microscópico e aleatório) e advectivo (macroscópico, através das correntes atmosféricas - ventos), cuja fronteira será adotada (conforme apresentada na figura 3), nesta primeira abordagem, sendo que: Γ_1 se encontra sobre o eixo x , Γ_2 se a 1000 km do eixo y e paralelo a ele, Γ_3 se encontra a 1000 km do eixo x e paralelo a ele e, por fim, Γ_4 se encontra sobre o eixo y .

Considerando que a fonte adotada será considerada sobre uma parcela do domínio (cultivar), aproximada por uma função do tipo exponencial decrescente, o transporte de um ponto a outro será afetado, principalmente, por gradientes de concentração, pelo vento e pela perda de alguma parcela de nitrogênio sintético para atmosfera (ver figura 4).

P1 componente do fluxo na direção y e P2 componente do fluxo na direção x .

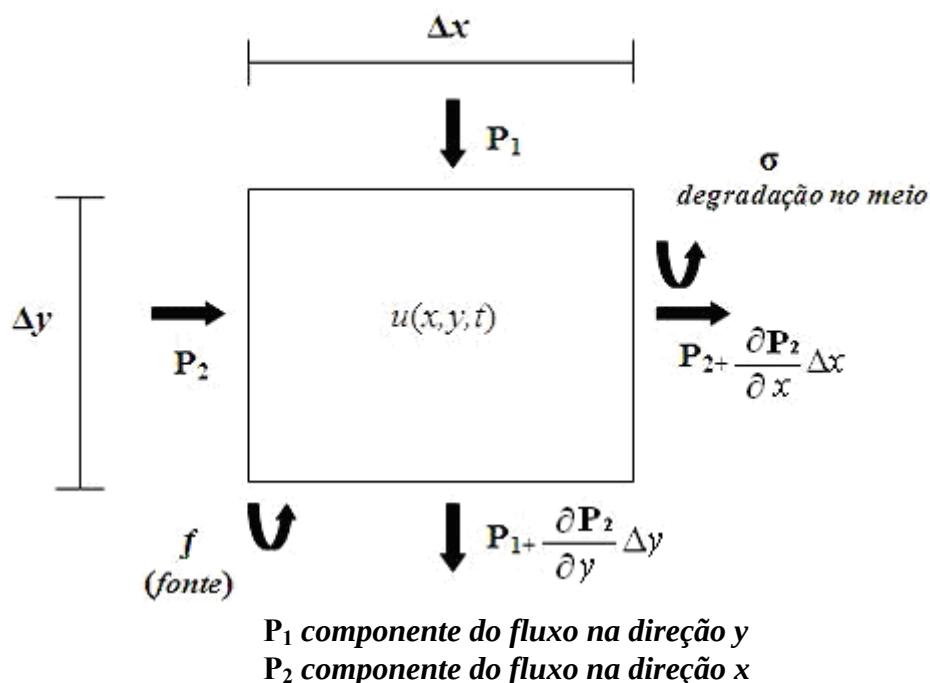


Figura 4: Elemento de área e principais fluxos de massa a ele relacionados.
(conforme adotado em ODI, 2005)

No modelo, será denominado $u(x,y,t)$ a concentração de nitrogênio sintético no ponto $(x,y) \in \Omega$, para o instante $t \in (0, T]$. Neste caso, a referida dispersão pode ser descrita através da equação diferencial parcial, denominada de difusão–advecção–reação, dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\{\text{difusão}\} - \{\text{transporte do meio}\} - \{\text{degradação}\} + \{\text{fonte}\} \quad (2.1)$$

que é obtida através da lei de conservação das massas (BASSANEZI e FERREIRA Jr.,1988)

A fonte descreve o mecanismo pelo qual a substância é introduzida no meio.

Em termos de modelagem clássica deste fenômeno, os termos apresentados acima são descritos por:

$$\begin{aligned} \{\text{difusão}\} &= \text{div}[-\alpha \nabla u] && (\text{conforme OKUBO,1980; SKELLAM, 1951}); \\ \{\text{transporte advectivo}\} &= \text{div}[\vec{V} u] && (\text{conforme EDELSTEIN-KESHET,1988}); \\ \{\text{degradação}\} &= \sigma u && (\text{conforme BASSANEZI e FERREIRA,1988}); \end{aligned}$$

Assim, a equação adotada para modelar o processo de dispersão efetiva do nitrogênio sintético no domínio estabelecido será dada por:

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

onde

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha = \alpha(x,y,t) & (\text{aproxima a difusibilidade efetiva no meio aéreo}) \\ \vec{V} = (v_1(x,y,t); v_2(x,y,t)) & \text{com} \\ \text{div}(\vec{V}) = 0 & (\text{aproximando um campo “bem comportado” no sentido dos} \\ & \text{fluxos aéreos}). \\ \sigma u & (\text{aproxima linearmente a degradação total no meio aéreo}) \\ f & (\text{aproxima o termo fonte}). \end{array} \right.$$

Seja η o vetor normal exterior unitário ao longo da fronteira Γ . As condições de contorno serão consideradas assintoticamente estacionárias (condições de Von Neumann – *cf.* BASSANEZI e FERREIRA Jr., 1988) que são dadas por;

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_i} = 0 \quad \forall t \in (0, T], i = 1, 2, 3, 4. \quad (2.3)$$

Esta condição simplificadora significa dizer que a entrada e saída de nitrogênio sintético no domínio, ao longo da fronteira, se anulam pelo fato de considerar a fronteira suficientemente distante, de modo que o balanço de entrada e saída na fronteira do domínio seja nulo (condição assintoticamente estável).

As equações (2.2–2.3) constituem a formulação clássica ou “forte” do problema. Em geral, as equações derivadas a partir das leis de conservação têm solução no sentido clássico.

A introdução da derivada no sentido das distribuições, feita no capítulo seguinte, permite obter a formulação variacional ou fraca, que facilita verificar a existência e unicidade de solução do problema, assim como a aplicação do método dos elementos finitos (via método de Galerkin) para a discretização espacial, de modo a obter as aproximações numéricas adequadas da solução do problema para instante $t \in (0, T]$, cuja descrição é feita no próximo capítulo.

CAPÍTULO 3

MÉTODO DE APROXIMAÇÃO DA SOLUÇÃO

3.1 FORMULAÇÃO VARIACIONAL

Existem situações em que a complexidade da geometria do domínio do problema ou as condições de fronteira são tais que dificultam a obtenção de uma solução analítica, ainda que se possa garantir a sua existência (VASQUES, 2005). Nestes casos, métodos de aproximação como o dos elementos finitos, via esquema de Galerkin, junto com um método adequado para a discretização temporal, são ferramentas úteis e essenciais para a obtenção de “soluções aproximadas”.

Uma justificativa para a solução fraca consiste na possibilidade de se usar funções que modelem fenômenos descontínuos, cuja solução deve ser procurada num espaço métrico conveniente. Neste sentido, deve ser obtida outra formulação do problema, dado em sua formulação clássica (ou forte) pelas equações (2.2-2.3).

A formulação variacional (ou fraca) a ser obtida para o problema consiste em:

Considerar as derivadas da formulação clássica no sentido das distribuições⁴ e multiplicar cada termo da equação (2.2) por uma função v , denominada função teste, sendo esta pertencente a um sub-espaço (MEYER e DINIZ, 2004) conveniente de:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v(x, y) \in L^2(x, y) : \frac{\partial v}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial v}{\partial y} \in L^2(\Omega) \right\}, \text{ que será denotado por } \mathcal{V},$$

caracterizado a seguir, onde L^2 é o espaço das funções de quadrado integrável no sentido de Lebesgue.

⁴ Ver Apêndice A (pág. 44) para mais detalhes.

Neste sub-espço $\mathcal{V}$, o produto interno é definido da seguinte forma:

$$(f|g)_{0,\Omega} := \iint_{\Omega} f \bar{g} \, d\mu, \quad (3.1)$$

$$(\vec{f}|\vec{g})_{0,\Omega} := \iint_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{g} \, d\mu, \quad (3.2)$$

$$\langle f|g \rangle_{0,\partial\Omega} := \int_{\Gamma} f \bar{g} \, d\gamma \quad (3.3)$$

Em seguida, é feita a integração da equação resultante, no sentido de Lebesgue, sobre o domínio Ω , fornecendo assim a chamada formulação variacional do problema.

Nesta primeira abordagem, o termo fonte será considerado homogêneo sobre uma parte do domínio Ω , cujas condições de contorno são aquelas apresentadas pela equação (2.3), ou seja, do tipo Von Neumann. Além disso, ao considerar a densidade do ar constante na faixa horizontal do domínio, permite uma aproximação do coeficiente de difusão aérea α nas equações (2.2) e (2.3) como constante no domínio considerado.

Desta forma, a equação (2.2) pode ser reescrita por:

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v \, d\mu = \alpha \iint_{\Omega} \operatorname{div}(\nabla u) v \, d\mu - \iint_{\Omega} \operatorname{div}(\vec{V}u) v \, d\mu - \sigma \iint_{\Omega} u v \, d\mu + \iint_{\Omega} C_0 e^{-\kappa t} v \, d\mu \quad (3.4)$$

Daí, considerando o produto interno definido em $\mathcal{V}$, e reagrupando no primeiro membro, se obtém:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} | v \right)_{0,\Omega} - \alpha (\nabla u | v)_{0,\Omega} + (\operatorname{div}(\vec{V}u) | v)_{0,\Omega} + \sigma (u | v)_{0,\Omega} = (C_0 e^{-\kappa t} | v)_{0,\Omega} \quad (3.5)$$

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

Agora, considerando o termo advectivo dado pelo campo constante para a velocidade do vento, nesta primeira abordagem, dado por $\vec{V} = (V_1, V_2)$, sendo V_i constante para um determinado intervalo de tempo, se obtém:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} | v \right)_{0,\Omega} - \alpha (\Delta u | v)_{0,\Omega} + V_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} | v \right)_{0,\Omega} + V_2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} | v \right)_{0,\Omega} + \sigma (u | v)_{0,\Omega} = (C_0 e^{-\kappa t} | v)_{0,\Omega} \quad (3.6)$$

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

Ao fazer o uso da primeira identidade de Green (IÓRIO Jr. e IÓRIO, 1988) para operadores (cf. LIONS, 1961), que aplicada ao termo $-\alpha(\Delta u|v)_{0;\Omega}$ da equação precedente, se obtém a seguinte igualdade para este termo:

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

que, substituindo em (3.6), se torna:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right)_{0;\Omega} + \alpha(\nabla u \|\nabla v)_{0;\Omega} - \alpha\langle u|v \rangle_{\Gamma} + V_1\left(\frac{\partial u}{\partial x}|v\right)_{0;\Omega} + V_2\left(\frac{\partial u}{\partial y}|v\right)_{0;\Omega} + \sigma(u|v)_{0;\Omega} = (C_0 e^{-\kappa t}|v)_{0;\Omega} \quad (3.7)$$

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

Como, por hipótese, a condição de contorno será considerada assintoticamente estável, ou seja, $-\alpha\langle u|v \rangle_{\Gamma} = 0$, o que resulta, na equação (3.7), em:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right)_{0;\Omega} + \alpha(\nabla u \|\nabla v)_{0;\Omega} + V_1\left(\frac{\partial u}{\partial x}|v\right)_{0;\Omega} + V_2\left(\frac{\partial u}{\partial y}|v\right)_{0;\Omega} + \sigma(u|v)_{0;\Omega} = (C_0 e^{-\kappa t}|v)_{0;\Omega} \quad (3.8)$$

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

Considerando, ainda, o decaimento global σ constante e que as componentes advectivas sejam definidas por: $V_1 = V\cos\theta$ e $V_2 = V\sin\theta$, sendo V a velocidade do vento na direção predominante e θ o ângulo da direção do vento, orientado no sentido anti-horário a partir do eixo à leste, o que determina as projeções da velocidade nas direções correspondentes aos eixos x e y , respectivamente. Daí, a equação se torna:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right)_{0;\Omega} + \alpha(\nabla u \|\nabla v)_{0;\Omega} + V\cos\theta\left(\frac{\partial u}{\partial x}|v\right)_{0;\Omega} + V\sin\theta\left(\frac{\partial u}{\partial y}|v\right)_{0;\Omega} + \sigma(u|v)_{0;\Omega} = (C_0 e^{-\kappa t}|v)_{0;\Omega} \quad (3.9)$$

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

Desta forma, a equação (3.9) define o problema em sua formulação variacional (ou fraca), com a vantagem que em (3.9), aparecerem apenas as derivadas

de primeira ordem, da função $u(x, y, t)$, no sentido de distribuições, enquanto na formulação clássica aparecem as derivadas de segunda ordem.

O próximo passo é demonstrar que a equação (3.9) satisfaz as hipóteses do Teorema de Lions, o que garante a existência e unicidade da solução fraca.

3.2 EXISTÊNCIA E UNICIDADE DA SOLUÇÃO

A fim de utilizar métodos de aproximação da solução analítica da equação (3.9), antes de tudo, é necessário garantir a existência e unicidade da solução procurada, para tal, será utilizado teorema de Lions (ver LIONS, 1961), o qual garante a existência e unicidade de solução para uma classe de problemas abstratos, reescrito aqui de modo adequado aos objetivos deste trabalho, seguindo a analogia adotada em DINIZ (2003).

Primeiramente, agrupando os termos de (3.9) na forma abaixo e adotando a notação usada no citado teorema (LIONS, 1961) tem-se:

$$\hat{A}(t, u) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} + \left(a_{ij}(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} a_i(x, t) + a_0$$

O que em (3.9), mediante as escolhas indicadas mais abaixo fornece:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} | v \right)_{0,\Omega} + \left(\hat{A}(t, u) | v \right)_{0,\Omega} = \left(C_0 e^{-kt} | v \right)_{0,\Omega} + \left(u_0 | v \right)_{0,\Omega} \delta_0(t), \quad (3.10)$$

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

ou, numa notação mais compacta:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} | v \right)_{0,\Omega} + A(t, u, v) = L_f(v), \quad (3.11)$$

onde:

$$A(t, u, v) = \iint_{\Omega} \hat{A}(t, u) v d\mu \quad \text{e} \quad L_f(v) = \iint_{\Omega} C_0 e^{-kt} v d\mu + \delta_0(t) \iint_{\Omega} u_0 v d\mu$$

Dadas as escolhas em (3.11) de:

$$\begin{cases} a_{ij} = \alpha & \text{se } i = j \\ a_{ij} = 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

$$a_i = \begin{cases} V \cos \theta & \text{para } i = 1 \\ V \sin \theta & \text{para } i = 2 \end{cases}$$

$$a_0 = \sigma$$

e $\delta_0(t)$ é o operador delta de Dirac que fixa a condição inicial.

Desta forma, considerando o teorema de Lions, enunciado como se segue:

Teorema (Lions): Dado o conjunto aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, considere os espaços $H^1(\Omega)$ e $H_0^1(\Omega)$ e $\mathcal{V}$, tais que: $H_0^1(\Omega) \subset \mathcal{V} \subset H^1(\Omega)$ para $w = w(x, t)$ e $v = v(x, t)$, seja o operador A dado por:

$$A(t, w, v) = \sum_{i,j=1}^n \int_{\Omega} a_{ij}(x, t) \frac{\partial w}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} a_i(x, t) \frac{\partial w}{\partial x_i} v dx + \int_{\Omega} a_0(x, t) w v dx$$

Se

i) a_{ij} , a_i e $a_0 \in \mathcal{V}(\Omega \times (0, T])$;

ii) $\forall w, v \in \mathcal{V}$, a função: $\Lambda: t \rightarrow A(t; w, v)$ é mensurável;

iii) $\exists \lambda \in \mathbb{R}$ tal que: $|A(t, w, w)|^2 + \lambda \|w\|_{L^2}^2 \geq \delta \|w\|_{H^1(\Omega)}^2$, $\delta > 0$, $w \in \mathcal{V}$, em quase todo ponto (q.t.p.);

iv) $|A(t, w, v)| \leq M \|w\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}$

v) $L_f(v) = \int_{\Omega} f v dx + \left(\int_{\Omega} w_0 v dx \right) \delta_0(t)$ é contínuo;

vi) $f \in L^2((-\infty, T); L^2(\Omega))$ e $w_0(x) \in L^2(\Omega)$;

então, existe uma função $w \in L^2((-\infty, T); L^2(\Omega))$ e $\{w: (-\infty, 0) \rightarrow 0\}$ que é a solução do problema variacional (3.11).

O passo seguinte é verificar que a equação (3.9) satisfaz as hipóteses do teorema. Assim, se tem que:

1) É imediato verificar que A satisfaz a hipótese i) tendo em vista a escolha de a_{ij} , a_i e a_0 .

2) A mensurabilidade do operador $A(t, w, v)$ está garantida pela própria definição de $A(t, w, v)$.

3) A hipótese *iii*), denominada coercividade do operador A , pode ser provada pelo que se segue:

$$\begin{aligned} A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 &= \iint_{\Omega} A(t; v) v d\mu + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \\ &= \iint_{\Omega} \alpha \nabla v \cdot \nabla v d\mu + V \iint_{\Omega} \cos \theta \frac{\partial v}{\partial x} v d\mu + V \iint_{\Omega} \sin \theta \frac{\partial v}{\partial y} v d\mu + \sigma \iint_{\Omega} v^2 d\mu + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} A(t, v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 &= \iint_{\Omega} \alpha \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu + V \cos \theta \iint_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x} v d\mu + \dots \\ &\quad \dots + V \sin \theta \iint_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial y} v d\mu + (\lambda + \sigma) \|v\|_{L^2}^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

uma vez que:

$$\begin{aligned} \left| V \cos \theta \iint_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x} v d\mu \right| &\leq |V \cos \theta| \iint_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial x} v \right| d\mu \leq |V| \iint_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| |v| d\mu \leq |V| \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \quad \text{e} \\ \left| V \sin \theta \iint_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial y} v d\mu \right| &\leq |V \sin \theta| \iint_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial y} v \right| d\mu \leq |V| \iint_{\Omega} \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| |v| d\mu \leq |V| \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2}, \end{aligned}$$

logo,

$$\left| V \iint_{\Omega} \cos \theta \frac{\partial v}{\partial x} v d\mu \right| + \left| V \iint_{\Omega} \sin \theta \frac{\partial v}{\partial y} v d\mu \right| \leq |V| \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) \|v\|_{L^2}$$

donde,

$$\left| V \iint_{\Omega} \cos \theta \frac{\partial v}{\partial x} v d\mu \right| + \left| V \iint_{\Omega} \sin \theta \frac{\partial v}{\partial y} v d\mu \right| \geq -|V| \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right) \|v\|_{L^2}$$

Assim, seja V = velocidade máxima do vento, daí, aplicando a desigualdade de Hölder ao 2º e 3º termos do lado direito da equação (3.13), com o uso da desigualdade acima, se obtém:

$$\begin{aligned} A(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 &\geq \alpha \iint_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu + (\lambda + \sigma) \|v\|_{L^2}^2 - \dots \\ &\quad \dots - V \left[\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \right] \end{aligned}$$

ou,

$$\begin{aligned}
A(t, v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 &\geq \alpha \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) + (\lambda + \sigma) \|v\|_{L^2}^2 - \dots \\
&\dots - V \left[\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \right]
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Agora, usando o recurso clássico da desigualdade $ab \leq \frac{\varepsilon}{2} a^2 + \frac{1}{4\varepsilon} b^2$

$\forall a$ e b positivos, que aplicado aos termos indicados abaixo, tem-se:

$$\begin{aligned}
\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} &\leq \frac{\varepsilon}{2} \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2 \\
\left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} &\leq \frac{\varepsilon}{2} \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2
\end{aligned}$$

Somando membro a membro, a desigualdade se torna:

$$\left[\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right] \|v\|_{L^2} \leq \frac{\varepsilon}{2} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) + \frac{1}{2\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2$$

logo,

$$-V \left[\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2} \right] \|v\|_{L^2} \geq -\frac{V\varepsilon}{2} \left(\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) - \frac{V}{2\varepsilon} \|v\|_{L^2}^2$$

daí, levando na desigualdade (3.14), se obtém:

$$A(t, v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \geq \left(\alpha - \frac{V\varepsilon}{2} \right) \left[\left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right] + \left(\lambda + \sigma - \frac{V}{2\varepsilon} \right) \|v\|_{L^2}^2$$

Assim, tomando $\delta = \min \left\{ \left(\alpha - \frac{V\varepsilon}{2} \right); \left(\lambda + \sigma - \frac{V}{2\varepsilon} \right) \right\}$ se pode escolher ε , de modo

que $\delta > 0$ e, portanto, tem-se:

$$A(t, v, v) + \lambda \|v\|_{L^2}^2 \geq \delta \left(\|v\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial x} \right\|_{L^2}^2 + \left\| \frac{\partial v}{\partial y} \right\|_{L^2}^2 \right) = \delta \|v\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \delta > 0, \quad v \in \mathcal{V}, \text{ para cada}$$

$t \in (0, T)$

4) A continuidade do operador A dada na hipótese iv) pode ser obtida pelo que se segue:

Dado que $\iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v d\mu + A(t, u, v) = L_f(v)$ onde $A(t, u, v) = \iint_{\Omega} \hat{A}(t, u) v d\mu$ e

$$\iint_{\Omega} \hat{A}(t; u) v d\mu = \iint_{\Omega} \alpha \nabla u \cdot \nabla v d\mu + V \iint_{\Omega} \cos \theta \frac{\partial v}{\partial x} d\mu + V \iint_{\Omega} \sin \theta \frac{\partial v}{\partial y} d\mu + \sigma \iint_{\Omega} u v d\mu$$

$$\text{Como } \iint_{\Omega} \alpha \nabla u \cdot \nabla v d\mu \leq |\alpha| \iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\mu$$

daí, para cada $t \in (0, T)$ seja $\xi = \max\{|\alpha|, |\sigma|\}$ e usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, se obtém:

$$|\alpha| \iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\mu + \sigma \iint_{\Omega} u v d\mu \leq \xi \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

$$\text{Além disso, } |V| \iint_{\Omega} \cos \theta \frac{\partial u}{\partial x} v d\mu \leq |V| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} v d\mu \text{ e } |V| \iint_{\Omega} \sin \theta \frac{\partial u}{\partial y} v d\mu \leq |V| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} v d\mu$$

Logo, pela desigualdade de Hölder, se tem que:

$$\begin{aligned} |V| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} v d\mu &\leq |V| \left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq |V| \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} \\ |V| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} v d\mu &\leq |V| \left\| \frac{\partial u}{\partial y} \right\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq |V| \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} \end{aligned}$$

Donde,

$$|A(t, u, v)| \leq \varepsilon \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} + |V| \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} + |V| \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

$$\text{Logo, tomando } M = \varepsilon + |V|, \text{ vem: } |A(t, u, v)| \leq M \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

5) Como o termo $L_f(v)$ é dado por: $L_f(v) = \iint_{\Omega} C_0 e^{-\kappa t} v d\mu + \left(\iint_{\Omega} u v d\mu \right) \delta_0(t),$

sabendo que $\|v\|_{L^2} \leq \mu(\Omega) \|v\|_{H^1(\Omega)} \forall v \in \mathcal{V}$, e dada escolha de $C_0 e^{-\kappa t} \in L^2(\Omega \times (0, T])$

tem-se que:

$$\left| L_f(v) \right| = \left| \iint_{\Omega} C_0 e^{-\kappa t} v d\mu + \left(\iint_{\Omega} u v d\mu \right) \delta_0(t) \right| \leq \|v\|_{L^2} + \|u\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq \|u\|_{L^2} \|v\|_{H^1(\Omega)},$$

o que satisfaz as hipóteses $v)$ e $vi)$ do teorema.

Portanto, existe uma única solução do problema (3.11) formulado variacionalmente.

3.3 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Este método é uma técnica geral para construção de aproximações da solução de um problema de valor de contorno (PVC), que envolve a divisão do domínio da solução num número finito de sub-domínios simples (os Elementos Finitos) e, usando conceitos variacionais, construir uma aproximante sobre a coleção de Elementos Finitos (CAREY e ODEN, 1981).

O método foi introduzido para tratar de problemas com origem na engenharia civil e, atualmente, vem sendo utilizado para aproximação da solução de equações diferenciais parciais aplicadas nas mais diversas áreas (BURDEN e FAIRES, 2003)

Para iniciar o procedimento, o domínio Ω é dividido em um conjunto de triângulos $T_1, T_2, \dots, T_m$, em que o i -ésimo triângulo tem os vértices, ou nós, indicados por:

$$V_j^{(i)} = (x_j^{(i)}, y_j^{(i)}), \text{ para } j = 1, 2, 3.$$

Para simplificar a notação, denota-se $V_j^{(i)}$ simplesmente por $V_j = (x_j, y_j)$ quando se trabalha com um triângulo de referência fixo T_r .

A cada vértice V_j é associado um polinômio linear.

Em seguida, é feita a escolha das funções base $\{\phi_1(x, y); \phi_2(x, y), \dots, \phi_m(x, y)\}$ definidas globalmente sobre os Elementos Finitos, nesta primeira abordagem do problema, do tipo linear por partes sobre cada elemento e satisfazendo a seguinte condição (CAREY e ODEN, 1981):

$$\phi(x_j, y_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}, \text{ onde } (x_j, y_j) \text{ são as coordenadas do } j\text{-ésimo nó da}$$

malha.

Dessa forma, se obtém sobre cada nó uma função pirâmide conforme a figura 5 a seguir.

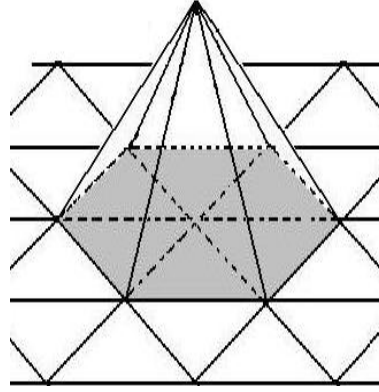


Figura 5: Função base $\varphi_i(x_j, y_j)$ definida sobre o j-ésimo nó.

A função definida por partes, em cada triângulo da discretização do domínio, é trabalhada localmente sobre o triângulo de referência T_r usando a sistemática de enumeração dos vértices para cada triângulo, chamando de $\hat{1}$ o vértice do ângulo reto e enumerando os vértices seguintes no sentido anti-horário; daí, se define localmente as três funções base.

Para esta discretização serão considerados distintamente dois tipos de triângulo, a saber, os triângulos inferiores T_i e triângulos superiores T_s . Em cada triângulo, as funções base serão definidas, localmente, conforme representado na figura abaixo:

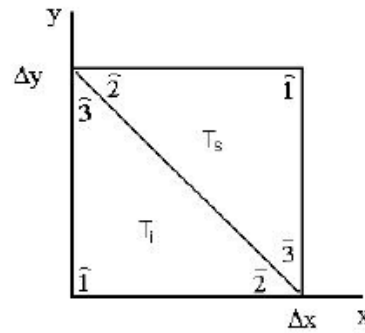


Figura 6: Triângulos de referência superior (T_s) e inferior (T_i)

Para os triângulos inferiores (T_i), as funções base serão:

$$\varphi_1(x, y) = 1 - \frac{x}{\Delta x} + \frac{y}{\Delta y} \quad \varphi_2(x, y) = \frac{x}{\Delta x} \quad \varphi_3(x, y) = \frac{y}{\Delta y}$$

Para os triângulos superiores (T_s), as funções base serão:

$$\varphi_1(x, y) = \frac{x}{\Delta x} + \frac{y}{\Delta y} - 1 \quad \varphi_2(x, y) = 1 - \frac{x}{\Delta x} \quad \varphi_3(x, y) = 1 - \frac{y}{\Delta y}$$

Pode ser verificado que, desta forma, as funções base $\varphi_i(x,y)$, definidas localmente, assumem o valor 1 no vértice “ $\hat{i}$ ” e zero nos outros dois, de modo que satisfaçam a propriedade imposta para as funções base.

Outra propriedade importante é que está garantida a continuidade das funções na fronteira de cada elemento, portanto, contínua no domínio Ω discretizado, o que torna $\varphi_i(x,y)$ de quadrado integrável, condição necessária para a construção das aproximações por elementos finitos.

3.4 DISCRETIZAÇÃO DO PROBLEMA

Será apresentada a discretização do modelo, para a formulação obtida na equação (3.9), através do Método dos Elementos Finitos (MEF) para a discretização espacial e Crank-Nicolson para a discretização temporal.

Para obter a discretização espacial via MEF, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema dada pela equação (3.9).

Denominando de $\mathcal{V}_h$ o subespaço de $H^1(\Omega)$ gerado pelas N_h funções φ_i (SIMMONS, 1963) – chamadas funções teste. Assim, toda $v_h \in \mathcal{V}$ é da forma:

$$v_h = \sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \varphi_j(x,y) \quad (3.12)$$

Considerando o subespaço $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, a equação (3.9) pode ser reescrita na forma do seguinte operador de equações diferenciais ordinárias (EDO):

$$\left(\hat{A}(t, u_h) | v_h \right)_{0,\Omega} + \left(\frac{du_h}{dt} | v_h \right)_{0,\Omega} = \left(C_0 e^{-\kappa t} | v_h \right)_{0,\Omega} \quad (3.13)$$

$$\forall v_h \in \mathcal{V}_h, \forall t \in (0, T]$$

O que, mediante as escolhas de a_{ij}, a_i, a_0 e a notação de produto interno indicados anteriormente, nos fornece o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias discretizado:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_h} \frac{du_j(t)}{dt} (\varphi_j | \varphi_i)_{0;\Omega} + \sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \left[\alpha (\nabla \varphi_j \| \nabla \varphi_i)_{0;\Omega} + V \cos \theta \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i \right)_{0;\Omega} + \dots \right. \\ \left. \dots + V \sin \theta \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i \right)_{0;\Omega} + \sigma (\varphi_j | \varphi_i)_{0;\Omega} \right] = (C_0 e^{-\kappa t} | \varphi_i)_{0;\Omega} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\forall \varphi_i \text{ da base de } \mathcal{V}_h, \forall t \in (0, T)$$

Em seguida, a discretização da variável temporal será obtida pelo método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em $(t_n + \frac{\Delta t}{2})$, fazendo as seguintes aproximações:

$$\frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}, \text{ onde } u_j^{n+1} = u_j(t_{n+1}) \quad (3.15)$$

e

$$u_j \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \quad (3.16)$$

Daí, levando (3.15) e (3.16) em (3.14) obtém-se o sistema linear:

$$\mathbf{A} u^{(n+1)} = \mathbf{B} u^{(n)} + \mathbf{d}^{(n+1/2)}, \text{ dado } u^{(0)}, \quad (3.17)$$

onde:

$$\begin{aligned} a_{ij} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \sigma \right) (\varphi_j | \varphi_i)_{0;\Omega} + \alpha \frac{\Delta t}{2} (\nabla \varphi_j \| \nabla \varphi_i)_{0;\Omega} + \dots \\ \dots + V \cos \theta \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big| \varphi_i \right)_{0;\Omega} + V \sin \theta \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \Big| \varphi_i \right)_{0;\Omega} \\ b_{ij} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \sigma \right) (\varphi_j | \varphi_i)_{0;\Omega} - \alpha \frac{\Delta t}{2} (\nabla \varphi_j \| \nabla \varphi_i)_{0;\Omega} - \dots \end{aligned}$$

$$\dots - V \cos \theta \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big|_{\varphi_i} \right)_{0;\Omega} - V \sin \theta \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \Big|_{\varphi_i} \right)_{0;\Omega}$$

$$d_i^{n+1/2} = \Delta t \left(C_0 e^{-\kappa(t_n + \Delta t/2)} \Big|_{\varphi_i} \right)_{0;\Omega}$$

A matriz **A** é chamada de matriz de rigidez e o vetor resultante das operações $\mathbf{Bu} + \mathbf{d}^{(n+1/2)}$, para cada instante $(t_n + \Delta t/2)$, é denominado vetor carga.

A ordem das aproximações temporais é, localmente, da ordem de Δt^2 .

3.5 ESTABILIDADE NUMÉRICA

A aproximação numérica para a solução de equações de transporte, como a apresentada neste estudo, pode trazer sérias dificuldades quando o termo advectivo/convectivo é preponderante na equação.

Isso pode ser observado por uma comparação entre os parâmetros α e V (caso constantes), se V for bem maior que α , certamente aparecerão oscilações numéricas na aproximação, nos casos em que o tamanho da malha usada excede um certo valor crítico (HEINRICH et al., 1977).

Ao se adotar o MEF, para obtenção de uma solução aproximada com elementos lineares e intervalos Δx e Δy relativamente grandes, tais oscilações indesejáveis aparecem.

A razão principal deste problema é que, a matriz associada ao termo advectivo/convectivo é não simétrica, podendo gerar sistemas mal condicionados (MOREIRA e WROBEL, 1983). Uma maneira de suprimir tais oscilações é usar malhas mais refinadas, de tal forma que a convecção/advecção perca a sua preponderância ao nível de elemento. Esta estratégia tem um custo operacional alto, já que, para uma malha muito refinada, a ordem do sistema obtido deverá ser bem maior, o que torna o sistema mais pesado do ponto de vista computacional.

Um critério onde se possa verificar a possibilidade do aparecimento dessas oscilações é denominado número de condição de Peclet, que é dado por:

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

O valor de P_e fornece uma condição sobre a discretização do domínio, de modo a suprimir o efeito das oscilações numéricas inerentes ao método utilizado.

Nas simulações que serão apresentadas no capítulo seguinte, este critério foi respeitado, de modo a obter simulações confiáveis do ponto de vista numérico.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E COMENTÁRIOS

Neste capítulo, serão apresentadas algumas simulações de cenários para análise da dispersão de nitrogênio sintético na atmosfera, de forma a testar os códigos numéricos implementados e o modelo proposto.

4.1 INTRODUÇÃO

Com o objetivo de aplicar o modelo matemático apresentado anteriormente, foram utilizados parâmetros nas simulações apresentadas mais adiante, tais como, coeficiente de difusão, velocidade e direção do vento, coeficiente de degradação, condição inicial e constante de decaimento, resultantes de dados levantados na literatura. No entanto, alguns parâmetros não foram encontrados e, assim, tiveram de ser estimados para a realização das simulações.

4.2 SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS

Os códigos foram desenvolvidos para utilização em ambiente MATLAB[®], cuja facilidade de interface gráfica, permite a obtenção de animações que descrevem o processo evolutivo de dispersão do nitrogênio sintético para o domínio discretizado, dentro de um determinado período de tempo previamente escolhido (DINIZ, 2007).

Os parâmetros adotados foram obtidos, da seguinte forma:

- Constante de decaimento da fonte (κ), adotada como em DINIZ (2007);
- Velocidade do vento (V), adotada conforme VOURLITIS et al, (2002);
- Coeficiente de difusão (α) foi escolhido, com base num espectro de valores constantes da literatura, para o coeficiente de difusão de alguns gases na atmosfera;
- Constante de degradação (σ) foi escolhido, com base num espectro de valores constantes da literatura, para a degradação de algumas substâncias na atmosfera;
- Carga de nitrogênio inicial (C_0) foi obtida pelo quociente entre a quantidade de fertilizante aplicada conforme ANDA (2002) e a área plantada, de acordo com FAMATO (2002).

As simulações a seguir, foram consideradas para ventos na estação seca, seca/úmida e úmida, para as duas direções mais freqüentes na área, isto é, de noroeste e de sudeste.

4.2.1 Simulação do primeiro cenário:

Neste cenário, foi considerada a estação seca, com vento de sudeste ($\theta = 3\pi/4$), cujos parâmetros estão apresentados na Tabela 1, a seguir.

Tabela 1: Parâmetros da simulação do cenário na estação úmida e vento de sudeste.

Parâmetros de modelo	Valores	Unidades
α	$1,2 \times 10^{-4}$	km^2/h
σ	$1,5 \times 10^{-4}$	h^{-1}
θ	$3\pi/4$	radianos
V	6.09	km/h
κ	5×10^{-1}	h^{-1}
C_0	1,39	ton/km^2
Parâmetros da discretização	Valores	Unidades
Δx	20	km
Δy	20	km
Δt	0,05	h

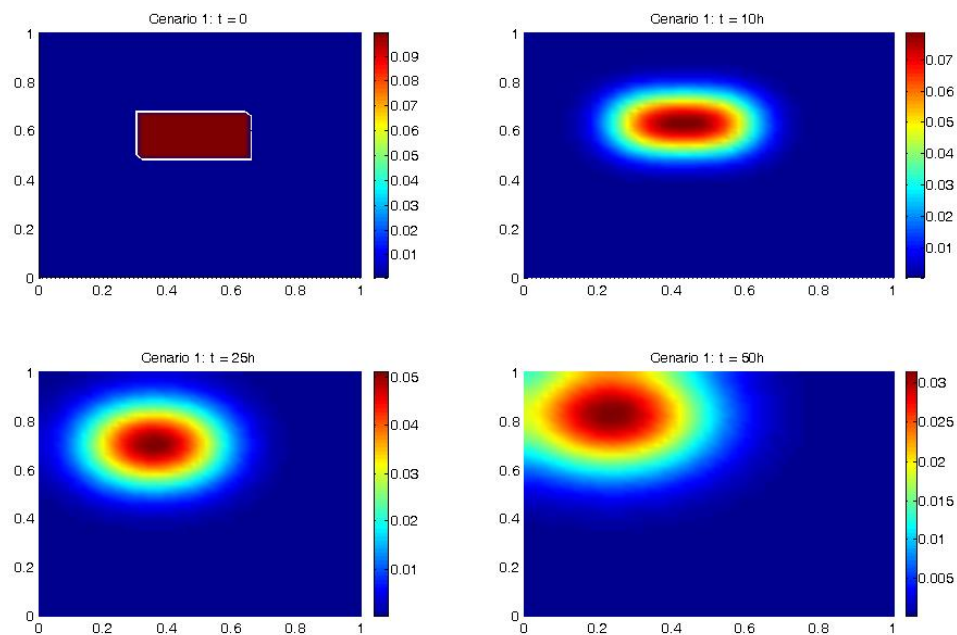


Figura 7 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético ao longo do domínio, na estação úmida com vento de sudeste (N^0 de Peclet = 0, 8132).

A figura a seguir (Fig. 8) apresenta o processo evolutivo da concentração de nitrogênio para um nó escolhido aleatoriamente, neste caso o nó 1250 cujas coordenadas são $(x,y) = (0.5;0.5)$, ao longo do tempo.

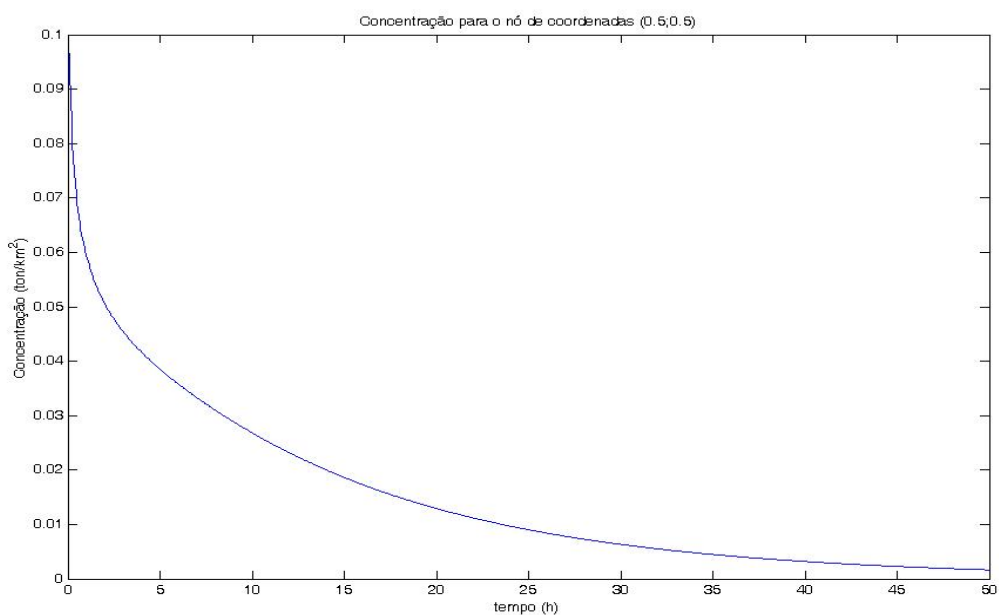


Figura 8: Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.2.2 Simulação do segundo cenário:

Este cenário simula a condição de vento de sudeste, na estação de transição seca/úmida, cujos parâmetros adotados são os mesmos da tabela 1, exceto $V = 7,68$ km/h e $\alpha = 1,7 \times 10^{-4}$ km²/h. Os resultados obtidos para esta simulação estão apresentados na Figura 9, a seguir:

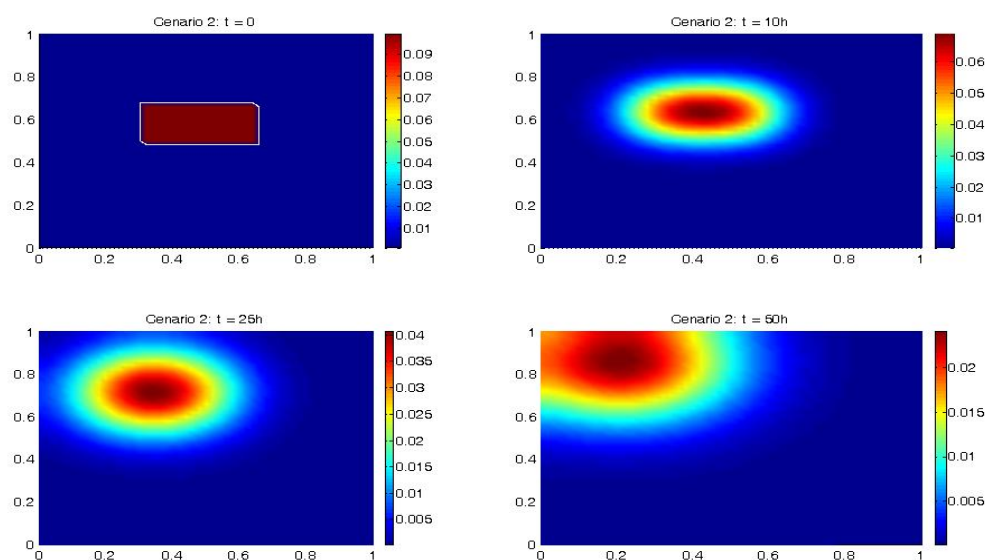


Figura 9 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético ao longo do domínio, na estação seca/úmida com vento de sudeste (N^o de Peclet = 0,6389).

A seguir, a Figura 10 apresenta o processo evolutivo para o nó 1250, neste segundo cenário.

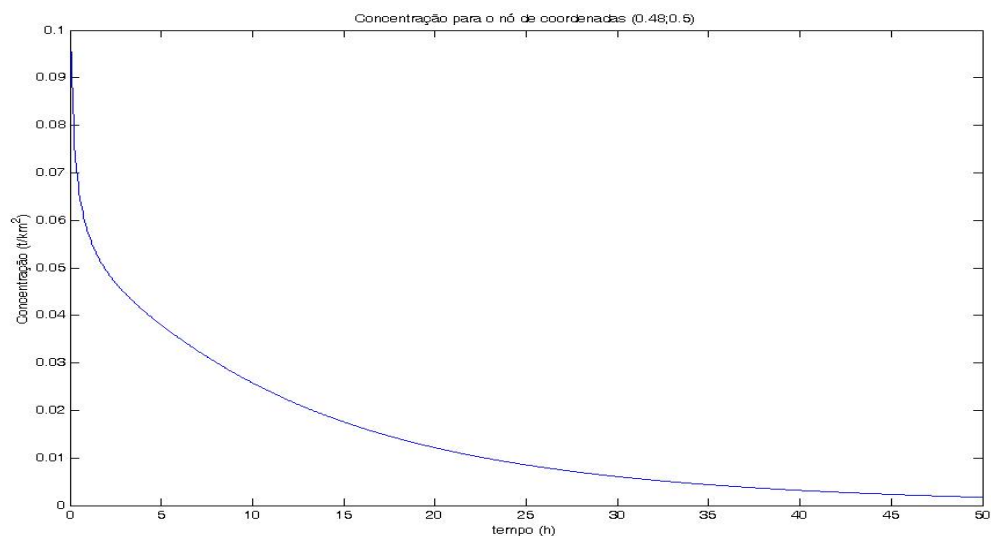


Figura 10 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.2.3 Simulação do terceiro cenário:

Neste cenário, é feita a simulação para a situação de vento de sudeste na estação seca, cujos parâmetros adotados foram os mesmos da Tabela 1, exceto $V = 8,6 \text{ km/h}$ e $\alpha = 2.2 \times 10^{-4} \text{ km/h}$. Os resultados obtidos estão apresentados na Figura 11, a seguir:

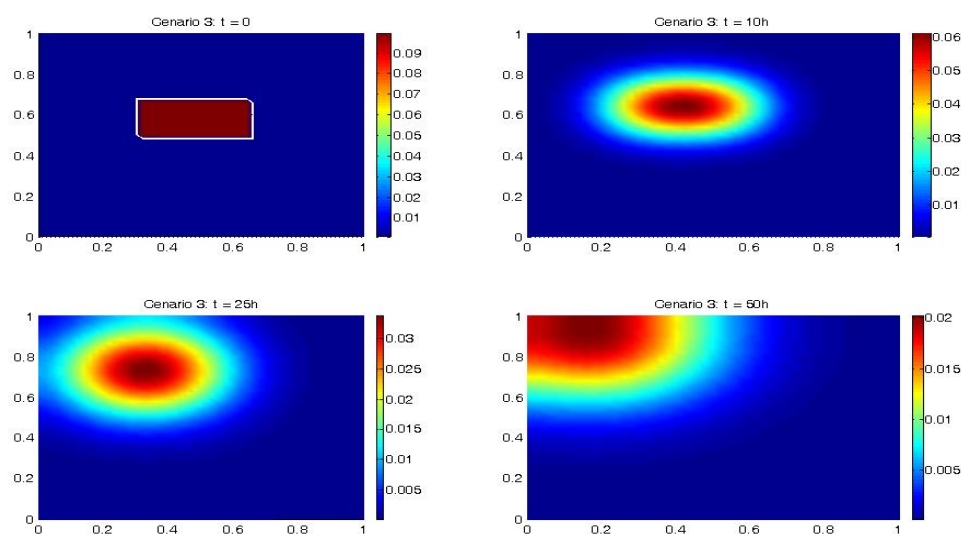


Figura 11 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação seca com vento de sudeste (N^o de Peclet = 0, 5528).

A Figura 12, a seguir, apresenta a concentração de nitrogênio sintético ao longo do tempo, para o nó 1250, neste terceiro cenário,

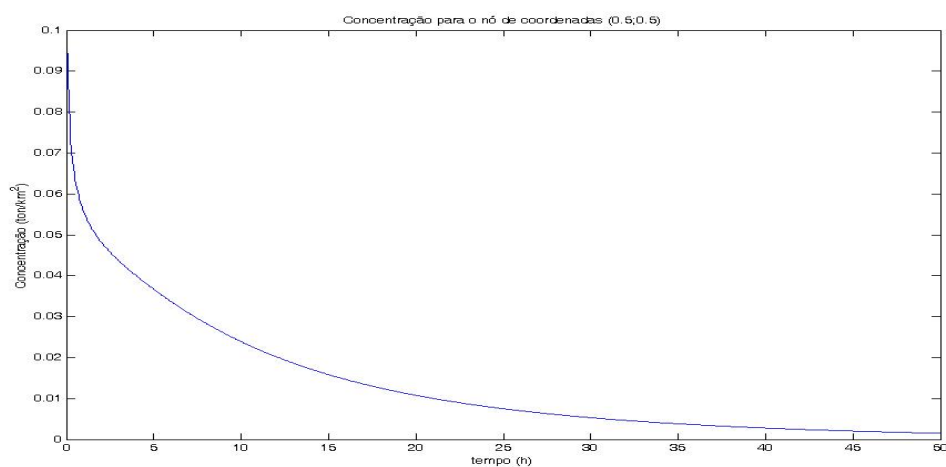


Figura 12 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.2.4 Simulação do quarto cenário:

Para este cenário, a simulação foi feita para a estação úmida, agora com vento de noroeste ($\theta = -\pi/4$). Nesta nova situação, os parâmetros utilizados foram os mesmos da Tabela 1, exceto $\theta = -\pi/4$ radianos e $V = 6,09$ km/h. Os resultados obtidos para esta simulação estão apresentados na figura 13, a seguir.

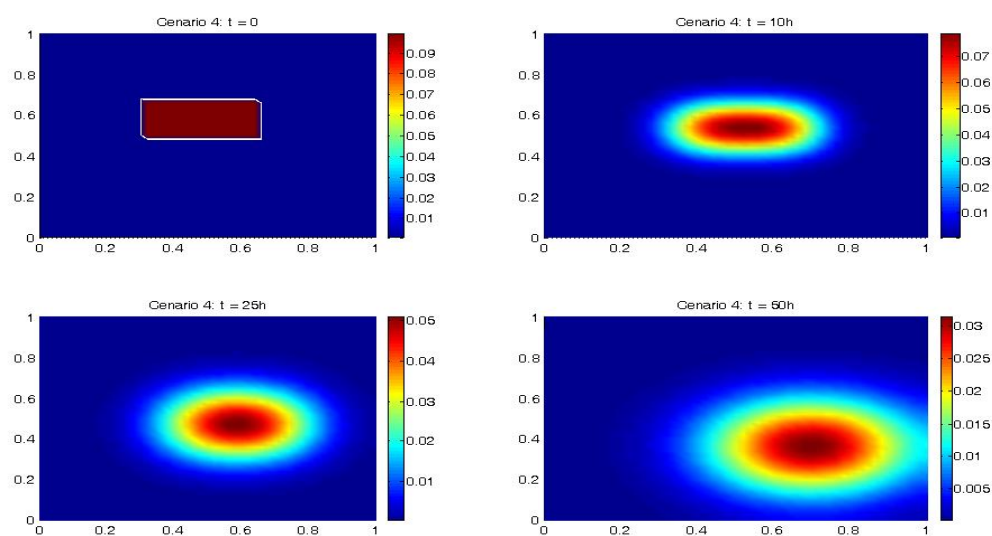


Figura 13 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação úmida com vento de noroeste (N^o de Peclet = 0, 7177).

A Figura 14, a seguir, apresenta a concentração de nitrogênio sintético ao longo do tempo, para o nó 1250, neste quarto cenário,

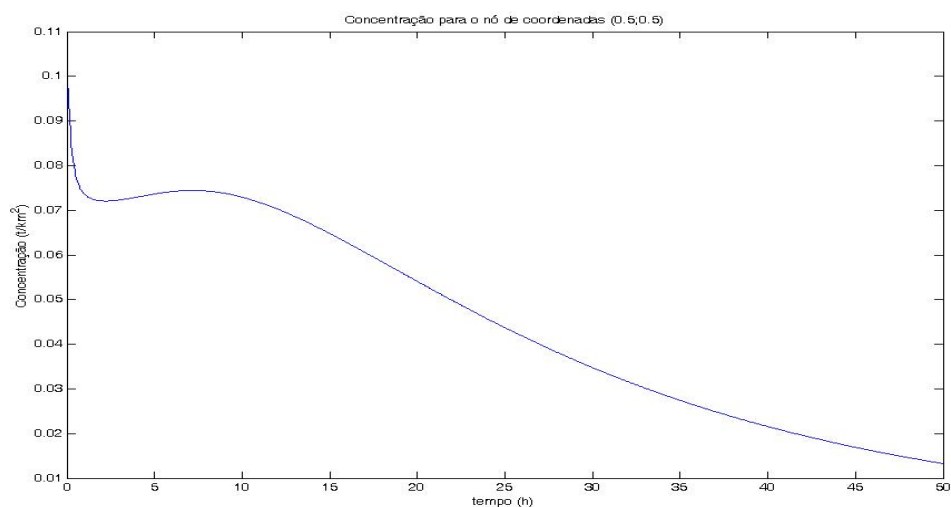


Figura 14 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.2.5 Simulação do quinto cenário:

Para este cenário, a simulação foi feita para a estação de transição úmida/seca, agora com vento de noroeste ($\theta = -\pi/4$). Nesta nova situação, os parâmetros utilizados foram os mesmos da Tabela 1, exceto $\theta = -\pi/4$ radianos, $V = 7,68$ km/h e $\alpha = 1,7 \times 10^{-4}$ km²/h. Os resultados obtidos para esta simulação estão apresentados na figura 15, a seguir.

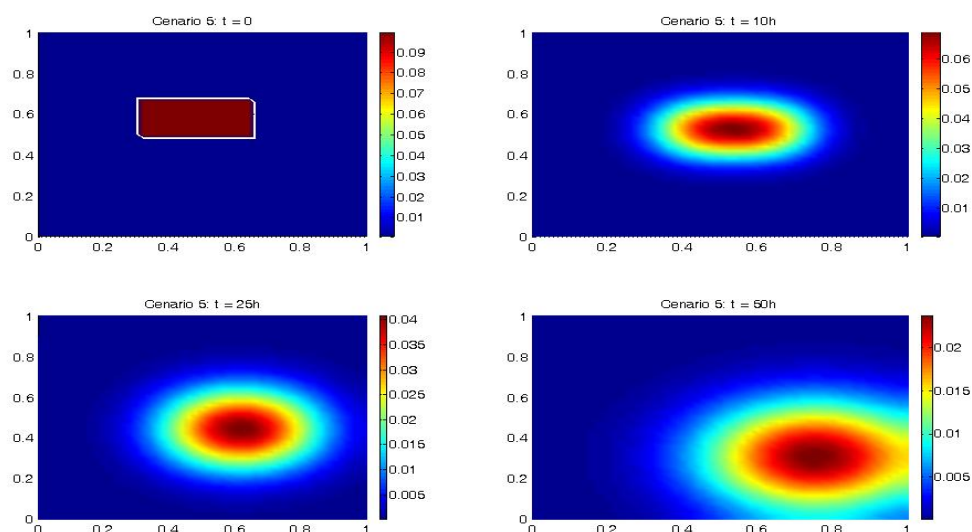


Figura 15 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação úmida/seca com vento de noroeste (Nº de Peclet = 0,6389).

Na Figura 16, a seguir, apresenta a concentração de nitrogênio sintético ao longo do tempo, para o nó 1250, neste quinto cenário.

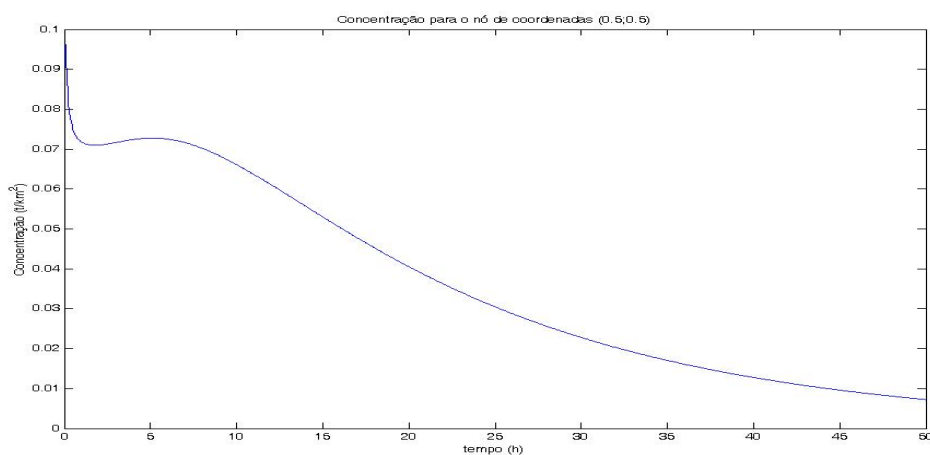


Figura 16 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.2.6 Simulação do sexto cenário:

Para este cenário, a simulação foi feita para a estação de transição seca, agora com vento de noroeste ($\theta = -\pi/4$). Nesta nova situação, os parâmetros utilizados foram os mesmos da Tabela 1, exceto $\theta = -\pi/4$ radianos, $V = 8,6$ km/h e $\alpha = 2,2 \times 10^{-4}$ km²/h. Os resultados obtidos para esta simulação estão apresentados na figura 17, a seguir.

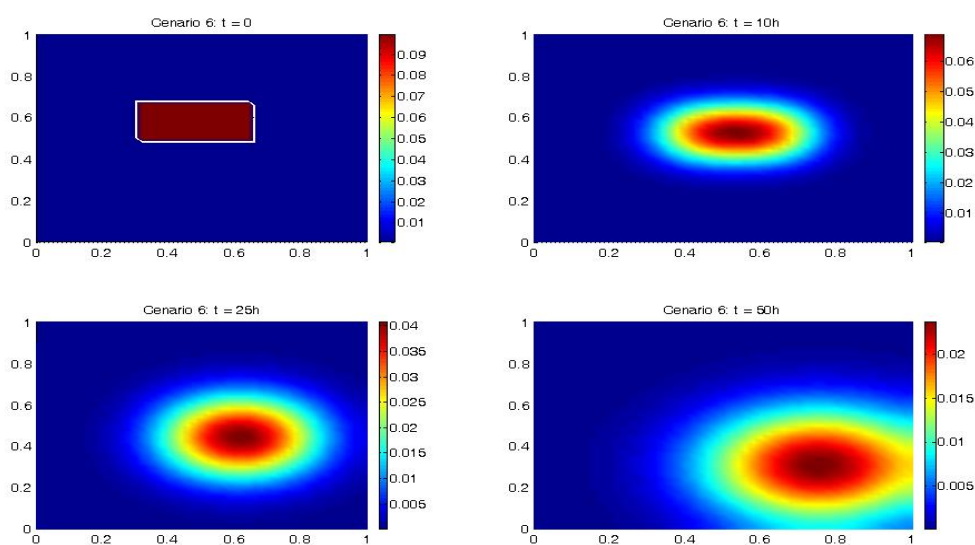


Figura 17 – Distribuição da concentração de nitrogênio sintético na estação seca com vento de noroeste (N^o de Peclet = 0,5528).

A Figura 18, a seguir, apresenta a concentração de nitrogênio sintético ao longo do tempo, para o nó 1250, neste sexto cenário.

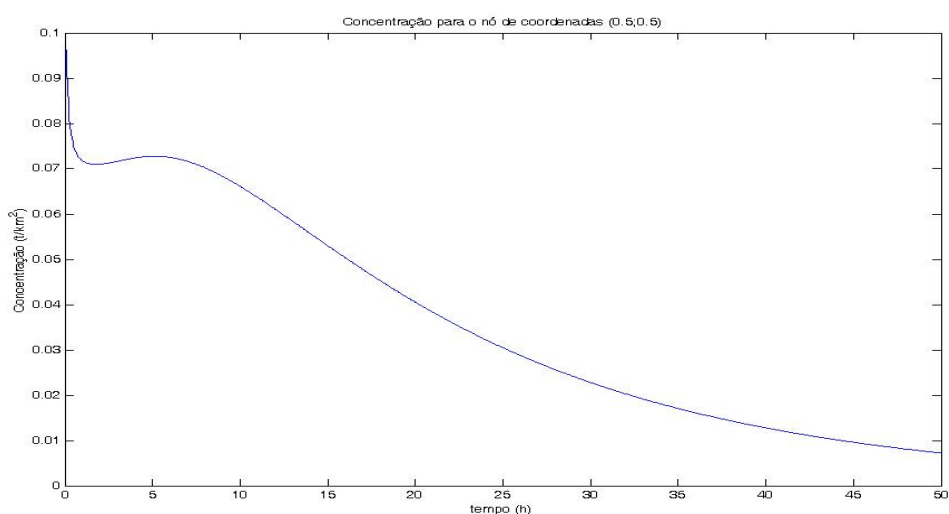


Figura 18 – Concentração de nitrogênio ao longo do tempo, para o nó 1250.

4.3. COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS

Para a figura 7, foram consideradas a velocidade de 6,09 km/h (estação úmida) e o coeficiente de difusão de $1,2 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$, com a direção de vento sudeste. Nesta figura pode ser observado que após a aplicação do nitrogênio sintético na área plantada, ocorreu a dispersão na direção do vento predominante, o movimento foi lento em função da velocidade do vento ter sido baixa.

Analizando a Figura 8, o processo evolutivo começou com a concentração máxima e decrescendo até atingir a concentração mínima, tendo em vista, que este nó está localizado no centro do domínio, onde foi feita a aplicação do nitrogênio sintético.

Na simulação do segundo cenário, apresentado na Figura 9, houve aumento da velocidade do vento para 7,68 km/h e do coeficiente de difusão para $1,7 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$ (estação úmida /seca) com a mesma direção adotada no cenário anterior. Neste cenário, se pode observar o processo de dispersão, porém, o processo ocorreu de forma um pouco mais rápida em função do aumento da velocidade do vento, basta observar a distribuição da concentração no canto superior esquerdo.

Analizando a figura 10, a concentração para o nó 1250, o processo evolutivo começou com a concentração máxima, decrescendo até atingir a concentração mínima.

Na simulação do terceiro cenário na figura 11 a velocidade do vento foi de 8,6 km/h (estação seca) e o coeficiente de difusão foi de $2,2 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$, com a direção do vento de sudeste. Este cenário mostra que a dispersão foi um pouco maior que no cenário anterior, também em função do aumento da velocidade do vento.

Observando a figura 12, que representa a concentração para o nó 1250, o processo evolutivo apresenta o mesmo comportamento dos cenários anteriores.

Na simulação do quarto cenário (Figura 13), a velocidade do vento considerada foi de 6,09 km/h (estação úmida), o coeficiente de difusão foi de $1,2 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$ e com a direção do vento de noroeste, em que se pode observar a dispersão na direção do vento predominante, após aplicação do nitrogênio sintético na plantação.

A Figura 14 representa a concentração para o nó 1250, ocorreu um decrescimento da concentração nos instantes iniciais, em seguida, houve um pequeno crescimento, seguido de um decrescimento lento até atingir a concentração mínima.

Na simulação do quinto cenário (Figura 15), a velocidade do vento considerada foi de 7,68 km/h (estação úmida/seca), o coeficiente de difusão foi de $1,7 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$ e com a direção do vento de noroeste. Neste cenário, se pode observar a dispersão na direção do vento predominante, porém, a dispersão se deu um pouco mais rápida.

A Figura 16 representa a concentração para o nó 1250, neste cenário o processo evolutivo apresentou um decrescimento da concentração nos instantes iniciais, em seguida, houve um pequeno crescimento, seguido de um decrescimento lento até atingir a concentração mínima.

Na simulação do sexto cenário (Figura 17), a velocidade do vento considerada foi de 8,6 km/h (estação seca), o coeficiente de difusão foi de $2,2 \times 10^{-4} \text{ km}^2/\text{h}$ e com a direção do vento de noroeste. Este cenário apresenta a dispersão mais rápida que o cenário anterior, na direção do vento predominante, após aplicação do nitrogênio sintético na plantação.

A Figura 18 representa a concentração para o nó 1250, cujo comportamento é semelhante ao dos dois cenários anteriores.

Para as seis simulações, a velocidade e direção do vento mostraram ser o fator determinante para o processo de dispersão da concentração do nitrogênio sintético, como já era esperado.

O número de Peclet, para as simulações apresentadas, esteve sempre menor que 2, garantindo a estabilidade numérica dos resultados obtidos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo matemático para a descrição do processo de dispersão de nitrogênio sintético, em uma área de estudo próximo a Sinop-MT, e desenvolvido um código numérico em ambiente MATLAB®, para obter a simulação de cenários de dispersão de nitrogênio sintético na área de estudo considerado.

O modelo matemático foi obtido com base em elementos clássicos da literatura.

A formulação variacional obtida teve garantida a existência e unicidade da solução fraca.

Tanto o modelo quanto o código implementado se mostraram adequados para a simulação dos cenários de dispersão. No entanto, devido a falta de dados reais, não foi possível fazer a validação do modelo. A contribuição deste trabalho, neste sentido, serve para estimular e orientar a obtenção de dados de campo, que contribuiriam para a sua validação.

Os modelos e os códigos numéricos aqui apresentados se mostraram ser uma ferramenta útil que poderão integrar futuros estudos como suporte para a avaliação de impactos ambientais, causados pelo uso excessivo de nitrogênio sintético e sua dispersão na atmosfera.

O presente estudo poderá continuar, junto com pesquisadores de outras áreas, em cooperação com outras instituições como: Empaer, Embrapa e Sema, garantindo assim um envolvimento interdisciplinar e interinstitucional para o aprimoramento do presente trabalho.

Fica como sugestão para os próximos estudos, que sejam consideradas as camadas acima de 100 metros de altitudes, coeficientes de difusão variável, e consideração da influência da topografia e da vegetação da área em estudo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMANN, H. **Linear and Quasilinear Parabolic Problems**. Basel : Ed. Birkhäuser. 1995.

BERRY, J.K. - **What's in a model**. GIS World, 8(1): 26-28, 1995.

BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática**. Ed. Contexto, São Paulo. 2006.

BASSANEZI, R. C. ; FERREIRA, JR. W. C. **Equações diferenciais com aplicações**. São Paulo: Ed. Harbra. 1988.

BORREGO, C.; MIRANDA, A.I. **Matemática e Ambiente: a redescoberta dos fundamentos básicos**. Dep. Eng. Ambiente, Univ. Aveiro, Disponível em <http://www.mat.uc.pt> acesso em 15 de janeiro de 2005.

BRESSAN, A. **Hyperbolic Systems of Conservation Laws: The One-Dimensional Cauchy Problem**. Oxford: Oxford Univ. Press. 2000.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise Numérica**- trad. Ricardo Lenzi Tombi. São Paulo- Pioneira Thomson Learning, 2003.

CAREY, G. F.; ODEN, J. T. **Finite Elements: mathematical aspects**, vol. 4. N. York: Prentice Hall. 1981.

CASTRO, F. Agência de notícia da Fundação de amparo à pesquisa do estado de São Paulo – **Faca de dois gumes**. Disponível em: <http://www.agencia.fapesp.br> acesso disponível em 28 de fevereiro de 2007.

CASTRO, S.P.E. **Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar**. 1993. Dissertação (Mestrado), IMECC, UNICAMP, Campinas/SP, 1993.

CHORLEY, R. J.; HAGGETT, P. **Modelos Físicos e de Informação em Geografia**. Rio de Janeiro. Livros Técnicos e Científicos. 1975.

CHRISTOFOLETTI, A. **Modelagem de Sistemas Ambientais**. 1ª Edição – São Paulo: Edgard Blucher, 1999.

DINIZ, G. L. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações**. 2003. Tese de doutorado. (FEEC/UNICAMP). Campinas: São Paulo, 2003.

EDELSTEIN-KESHET, L. **Mathematical models in biology**. N. York. Random-House, 1998.

EMBRAPA. **Brasil visto do espaço**. Disponível em: <http://www.embrapa.br> última atualização 8 de junho de 2004.

HAINES – YOUNG , R. H.; PETCH, J. R. **Physical Geography: Its Nature and Methods**. Harper and Row, London. 1986.

HEIN, N.; BONA, J. **Modelos Associados à qualidade do ar**. Universidade Regional de Blumenau – FURB (preprint). 2002.

HEINRICH, J. C.; HUYAKORN, P. S.; MITCHELL, A. R.; ZIENKIEWICZ, O. C. An upwind finite elements Scheme for two-dimensional convective transport equation. *Int. J. Num. Meth. In Eng.*, vol. 11, 131-143. 1977.

IÓRIO JR, R. J.; IÓRIO, V. **Equações diferenciais parciais: Uma introdução**. Rio de Janeiro, IMPA/CNPq, 1988.

IPCC. Climate Change. **Impacts, adaptations and mitigation of climate change: Scientific-Technical Analysis**. Cambridge: University Press, 1996. 878p.

IPCC, OECD, IEA. **Revised 1996 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gás Inventories**. Bracknell: UK. 1997.

JØRGENSEN, P. R.; McKAY, L.D.; SPLID, N.H. Evaluation of chloride and pesticide transport in a fracture clayey till using large undisturbed columns and numerical modeling. *Water Resourc Research* 34. n°4: pp. 539-553.1998.

KAISER, E. A; KOHRS, K.; KUCKE, M; et al. Nitrous oxide release from arable soil: importance of n-fertilization, crops and temporal variation. *Soil Biol. Biochen*, v. 30m n. 12, pp. 1553-1563, 1998.

KRUMBEIN, W. C.; GRAIBYLL, F. A. **An Introduction to Statistical Models in Geology**. New York, McGraw Hill, 1965.

KOLMOGOROV, A. N.; FOMIN, S. V. **Elementos da teoria das funções e de Análise Funcional**. Trad. M. Dombrosky. Moscou: Ed. Mir. 1976.

LIONS, J. L. **Equations Differentielles Operationelles**. Berlim: Springer, 1961.

MARTINELLI, L. A. Agência de noticia da Fundação de amparo à pesquisa do estado de São Paulo – **Faca de dois gumes**. Entrevista concedida a Fábio de Castro em fevereiro de 2007.

MARTINELLI, L. A. Correio Popular/Caderno Especial Cenário XXI, **Nitrogênio outra questão mundial**. Entrevista concedida a Raquel Lima em fevereiro de 2007.

McLONE, R. R. **Mathematical modelling – The art of applying mathematics**; (Andrews – McLane), Butterwords, London. 1976.

MEYER, J. F. C. A., DINIZ, G. L. Pollut and dispusion in wetland systems: Mathematical modelling and numerical simulation. *Ecological Modelling*, vol. 200. 360-370, 2007.

MOREIRA, J. C.; WROBEL, L. C. **Um modelo de elementos finites para análise de dispersão**. Relatório interno COPPE-UFRJ. 1983.

MURRAY, J. D. – **Mathematical Biology, Biomath.** Texts 19, Springer – Verlag, USA. 1990.

ODI, N.L. G. **Estudos dos fluxos superficiais de vapor d'água ma área da represa do Rio Manso/MT: modelagem e simulações**, Cuiabá, MT. 2005. p.90, Dissertação (Mestrado) – Instituto de Ciências Exatas e da Terra. Universidade Federal de Mato Grosso. 2005.

OKUBO, A. **Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models**. Springer, Berlin. 1980.

PAUL, E. A.; CLARK, F.E. **Soils microbiology and Biochemistry**. San Diego: Academic Press, 1996. 340p.

PINTO-JR, O. B. **Fluxo de CO₂ do solo em floresta de transição Amazônica – Cerrado e em área de pastagem**. Cuiabá, 2007. 79p. Dissertação (mestrado em física e meio ambiente) – Instituto de Ciência e Exatas e da Terra. Universidade Federal de Mato Grosso. 2007.

REVORA, S. A. **Manual de Gestion Ambiental para Obras Hidráulicas de Aprovechamento Energético**. Buenos Aires, Secretaria de Energia da República Argentina. 1987.

RITCHIE, G. A.; NICHOLAS, D.J.D. **Identification of the sources of nitrous oxide produced by oxidative and reductive process in Nitrossomonsas europea**. *Biochem. J.* 126: 1181-1191. 1972.

ROYDEN, H. L. **Real Analysis**. N. York: Ed. Macmillan Co. 1971.

SIMMONS, G. F. **Topology and Modern Analysis**. New York: McGraw-Hill, 1963.

SKELLAM, J. G. Random dispersal in theoretical population, *Biometrika*, v.38, 196-218, 1951.

SKIBA, U.; SMITH, K. A.; FOWLER, D. Nitrification and denitrification as source of nitric oxide and nitrous oxide in a sandy loam soil. *Soil Biol. Biotchem*, 25; 152-15. 1993.

VÁSQUES, J.C.S. **Comportamento evolutivo de descarga de água de produção decorrente de atividade offshore: tratamento numérico e simulação**

computacional. 2005, 83 f. Tese (doutorado) – Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, Campinas-2005.

VOURLITIS.G.L.; PRIANTE FILHO, N.; HAYASHI. M.M.; NOGUEIRA.J.S.
de:CASEIRO. F.: CAMPELO JR., J.H. *Seasonal variations in evapotranspiration of a transitional tropical Forest of Mato Grosso, Brazil*. **Water Resources Research**. V.38,n.6, 30-1-30-11, 2002.

APÊNDICE A

CONCEITOS, DEFINIÇÕES E TEOREMAS

Definição 1: Uma função de variável real que se anula fora de um conjunto compacto é dita de suporte compacto.

Definição 2: Uma função f de suporte compacto Ω é dita mensurável se a integral de Lebesgue $\int_{\Omega} |f| d\mu < \infty$

Definição 3: Uma função mensurável f pertence ao espaço de L^p se $\int_{\Omega} |f|^p d\mu < \infty$.

Definição 4: Para funções $f \in L^p$ se define $\|f\|_p = \left(\int_{\Omega} f^p d\mu \right)^{1/p}$

1. Desigualdade de Hölder:

Considere o produto interno dado por: $\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f g d\mu$, onde $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto compacto, com f e g funções mensuráveis. Sejam p, q tais que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$,

$\|f\|_p = \left(\int_{\Omega} f^p d\mu \right)^{1/p}$ e $\|g\|_q = \left(\int_{\Omega} g^q d\mu \right)^{1/q}$. Nestas condições se tem a chamada desigualdade de Hölder (cf. ROYDEN, 1971), que é dada por: $\langle f, g \rangle \leq \|f\|_p \|g\|_q$.

2. IDENTIDADES DE GREEN:

Temos três identidades fundamentais usadas freqüentemente. As duas primeiras são conseqüências imediatas do teorema da divergência.

PROPOSIÇÃO 1: *Sejam $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ um domínio limitado onde vale o teorema da divergência e $u, v \in C^2(\overline{\Omega})$. Então*

$$\int_{\Omega} (v\Delta C + \nabla C \cdot \nabla v) dx = \int_{\partial\Omega} v \frac{\partial C}{\partial \nu} d\sigma \quad (3.1)$$

$$\int_{\Omega} (v\Delta C - C\Delta v) dx = \int_{\partial\Omega} \left(v \frac{\partial C}{\partial \nu} - C \frac{\partial v}{\partial \nu} \right) d\sigma \quad (3.2)$$

onde ν denota a normal externa em $\partial\Omega$ e $\frac{\partial C}{\partial \nu}, \frac{\partial v}{\partial \nu}$ são as derivadas direcionais de C e v na direção normal.

DEMONSTRAÇÃO: Para provar (3.1) note que $\nabla \cdot (C\nabla v) = C\Delta v + \nabla v \cdot \nabla C$ e aplique o teorema da divergência, lembrando que $\nabla v \cdot \nu = \frac{\partial v}{\partial \nu}$. Para provar (3.2), troque C por v na primeira identidade e subtraia a identidade resultante de (3.1).

Observe que se $u \in C^2(\overline{\Omega})$ e $\Delta u = 0$ em Ω , então a proposição acima implica as seguintes relações

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial u}{\partial \nu} d\sigma \quad (3.3)$$

$$\int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \quad (3.4)$$

As identidades (3.1), (3.2) são conhecidas como a *primeira e a segunda identidades* de Green, respectivamente (cf. IÓRIO e IÓRIO, 1988).

3. CONCEITOS VARIACIONAIS

Nas subseções seguintes serão abordados alguns conceitos básicos de forma a definir os termos empregados ao longo desta dissertação. Outros conceitos mais comuns, que por ventura tenham sido omitidos, podem ser encontrados em referências como, por exemplo, BASSANEZI e FERREIRA Jr. (1988) – para equações diferenciais, ou KOLMOGOROV e FOMIN (1976) e SIMMONS (1963) – para Análise Funcional.

3.1. Distribuições

Para o estudo de soluções de equações diferenciais parciais dentro da classe de funções localmente integráveis, possivelmente funções descontínuas, a diferenciação precisa ser interpretada num sentido generalizado. Aqui, será feita uma revisão breve de alguns conceitos básicos sobre distribuições.

Seja Ω um subconjunto aberto de $\mathbb{R}^m$. Para todo compacto $K \subset \Omega$, denotamos por $D_K(\Omega)$ o conjunto de todas as funções de classe C^∞ definidas de Ω em $\mathbb{R}$ que se anulam fora de K . Denota-se por $D(\Omega)$ o conjunto de todas as funções C^∞ , $\phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto contido em Ω .

Denomina-se multi-índice à m-upla de inteiros não negativos $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$. A todo multi-índice α associamos o operador diferencial:

$$D^\alpha = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{\alpha_1} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial x_m} \right)^{\alpha_m} \text{ com ordem } |\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_m. \text{ Para cada } N \geq 0, \text{ definimos}$$

a norma:

$$\|\phi\|_N = \max \left\{ |D^\alpha \phi(x)|; x \in \Omega, |\alpha| \leq N \right\}$$

Com as notações acima, o espaço de distribuições a valores vetoriais, denotado por $D'(\Omega; \mathbb{R}^n)$, é o conjunto de todas as aplicações $\Lambda : D(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^n$, com a seguinte propriedade: - Para todo compacto $K \subset \Omega$, existem um inteiro N não-negativo e uma constante C , tais que:

$$|\Lambda(\phi)| \leq C \|\phi\|_N \quad \forall \phi \in D_K(\Omega)$$

Se existe algum inteiro N para o qual a inequação acima vale $\forall K$ (possivelmente com diferentes valores de C), o menor desses N determina a ordem de Λ . Se Λ tem ordem 0, então tal aplicação pode ser estendida por continuidade ao conjunto de todas as funções contínuas $\varphi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto. Neste caso, Λ pode ser identificada com a medida do vetor sobre Ω .

A função característica de um conjunto K é definida por:

$$\chi_K(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in K, \\ 0 & \text{se } x \notin K. \end{cases}$$

Dizemos que uma função $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ é integrável localmente se, para todo compacto $K \subset \Omega$, o produto $f \cdot \chi_K$ de f pela função característica de K é integrável, o que denotamos por $f \in L^1_{loc}$.

- Uma sequência de funções $(f_\nu)_{\nu \geq 1}$ converge para $f \in L^1_{loc}$ se a sequência $(f_\nu) \cdot \chi_K \in L^1$, para todo conjunto compacto K .

- Toda $f \in L^1_{loc}(\Omega; \mathbb{R}^n)$ determina uma distribuição de ordem 0, definida por:

$$\Lambda_f(\phi) = \int_{\Omega} f(x)\phi(x)dx \quad \forall \phi \in D(\Omega).$$

- Se α é um multi-índice e $\Lambda \in D'(\Omega)$, então a derivada $D^\alpha \Lambda$ é a distribuição:

$$D^\alpha \Lambda(\phi) = (-1)^{|\alpha|} \Lambda(D^\alpha \phi) \quad \forall \phi \in D(\Omega).$$

- Se uma função f é N vezes continuamente diferenciável e $|\alpha| \leq N$, então, usando a notação acima, tem-se $D^\alpha \Lambda_f = \Lambda_{D^\alpha f}$.

3.2. Diferenciabilidade de funções Lipschitz contínuas

Seja $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. Dizemos que f é diferenciável num ponto x_0 , se existe uma aplicação linear $Df(x_0): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ tal que:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \omega) - f(x_0) - [Df(x_0)]\omega}{|\omega|} = 0$$

Dizemos que f é *Lipschitz contínua*, se $|f(x) - f(y)| \leq L|x - y|$ para alguma constante L e x, y no domínio de f . Um resultado importante que se tem para funções de uma variável, é que toda função que é Lipschitz contínua é absolutamente contínua e, portanto, diferenciável. O teorema a seguir estende este resultado para funções de várias variáveis, e usa o conceito de quase toda parte da Teoria da Medida (denotado por “qtp”).

Teorema 1.1 (Rademacher). *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ localmente Lipschitz contínua. Então f é diferenciável qtp.*

Prova: A demonstração deste teorema se encontra em (BREISSAN, 2000, Teor. 2.8 – Cap.2, pg.23-25).

3.3. Convergência fraca de medida e solução fraca

Um conceito básico muito utilizado em Teoria da Medida e Análise Funcional é o da convergência fraca, descrito a seguir.

Denominando $C_c(\Omega)$ o espaço normado de todas as funções contínuas $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto, cuja norma é dada por: $\|u\| = \sup_{x \in \Omega} |u(x)|$. O completado deste espaço é o espaço de Banach $C_0(\Omega)$ de todas as funções contínuas f que têm a seguinte propriedade:

$$\forall \epsilon > 0 \text{ existe um compacto } K \subset \Omega, \text{ tal que } |f(x)| < \epsilon, \forall x \notin K$$

Sejam Ω um aberto de $\mathbb{R}^n$ e μ uma medida sobre Ω . O teorema de representação de Riesz estabelece um isomorfismo isométrico entre o espaço $\mathcal{M}(\Omega)$ das medidas limitadas sobre Ω , munido da norma $\|\mu\| := |\mu|(\Omega)$ e o espaço dual $C_0(\Omega)^*$, cujos elementos são funcionais lineares contínuos sobre $C_0(\Omega)$.

Isto é, para toda $\mu \in \mathcal{M}(\Omega)$ a aplicação $f \mapsto \int_{\Omega} f d\mu$ é um funcional linear

limitado. Mais ainda: $\sup_{f \in C_0(\Omega), \|f\| \leq 1} \left| \int_{\Omega} f d\mu \right| = |\mu|(\Omega)$.

Definição 3.1. Diz-se que uma seqüência de medidas $\mu_\nu \in \mathcal{M}(\Omega)$ converge fracamente para μ e denota-se $\mu_\nu \rightharpoonup \mu$, se $\lim_{\nu \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f d\mu_\nu = \int_{\Omega} f d\mu \quad \forall f \in C_c(\Omega)$.

Outro conceito importante em Análise Funcional é o de solução fraca, que tem sua aplicação no campo das soluções descontínuas, ou soluções no sentido de distribuições para sistemas onde se tem a lei de conservação satisfeita. A vantagem de se trabalhar com este tipo de solução, está no fato de que nenhuma regularidade é exigida a priori, como por exemplo, o conjunto de pontos de descontinuidade pode até ser denso. Isto amplia, consideravelmente, o conjunto de candidatas a solução. A definição para este tipo de solução, apresentada a seguir, é dada em Bressan (2000).

Definição 3.2 (Solução fraca). Seja $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ um campo vetorial suave. Uma função mensurável $u = u(x, t)$, definida sobre um domínio aberto $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, com imagem em $\mathbb{R}^n$, é uma solução fraca, ou no sentido de distribuições, para o sistema com a lei de conservação:

$$u_t + f(u)_x = 0$$

(A.1.1)

Se, para toda função de classe C^l , $\phi: \Omega \mapsto \mathbb{R}^n$, com suporte compacto, u satisfaz a equação:

$$\iint_{\Omega} [u \phi_t + f(u) \phi_x] dx dt = 0$$

(A.1.2)

Os índices nas equações (A.1.1) e (A.1.2) referem-se às derivadas parciais de u .

Outros conceitos variacionais podem ser encontrados em BRESSAN (2000); AMANN (1995) e KOLMOGOROV e FOMIN (1976).

APÊNDICE B

1 CÓDIGOS PARA MATLAB®

São apresentados os códigos numéricos utilizados na implantação do método numérico para aproximações da solução do problema.

```

56      %      Aproximacao de um sistema linear para simular a
           dispersao
57      %      aerea de Nitrogenio sintetico num dominio
           retangular horizontal
58      %
59      clear all; t0=clock; %format long;
60      %
61      %      parâmetros do modelo
62      %
63      1 a0=0.00012;           % coeficiente difusivo
64      2 sgu=1.5e-4;           % coeficiente de degradação
65      3 tet=3*pi/4;           % direcao do vento
66      V = 0.0069;             % velocidade do vento
67      v1= V*cos(tet);         % componente advectiva na direcao
           x
68      v2= V*sin(tet);         % componente advectiva na direcao
           y
69      k = 5.0e-1;             % decaimento da fonte
70      Co= 1.39;               % aplicacao maxima no cultivar
71      %
72      %      parametros do dominio (espaco e tempo)
73      %
74      xmax=1; ymax=1;        % x1000 km
75      tfinal=50.0;
76      %
77      %      parametros da discretizacao
78      %
79      nx=50;                  % no. de subintervalos em x
80      ny=50;                  % no. de subintervalos em y
81      nnx=nx+1;              % no. de nos na direcao x
82      nny=ny+1;              % no. de nos na direcao y
83      npt=1000;              % no. de passos no tempo
84      dx=xmax/nx;             % comprimento do subintervalo na direcao x
85      dy=ymax/ny;             % comprimento do subintervalo na direcao y
86      %
87      %      parametros auxiliares da discretizacao
88      %
89      dxy=dx*dy;
90      dxdy=dx/dy;
91      dydx=dy/dx;
92      dt=tfinal/npt;
93      mdt=dt/2;
94      nn=nnx*nny;             % no. total de nos nao-nulos
95      ntr=2*nx*ny;            % no. total de triangulos

```

```

96      nty=2*ny;      % no. de triangulos na direcao y
97      %
98      %      calculo do no. de Peclet
99      %
100     npec1 = abs(v1*dx)/(a0);
101     npec2 = abs(v2*dy)/(a0);
102     %
103     %      montagem da malha de elementos finitos
104     %
105     k=0;
106     for i=1:nx;
a.   for j=1:ny;
b.   k=k+1;
c.   ind = (i-1)*nny + j;
d.   malha(k,1)=ind;
e.   malha(k,2)=ind+nny;
f.   malha(k,3)=ind+1;
g.   k=k+1;
h.   malha(k,1)=ind+nny+1;
i.   malha(k,2)=ind+1;
j.   malha(k,3)=ind+nny;
107   end;
108   end;
109   %
110   %      montagem da malha de coordenadas dos nos
111   %
112   k=1;
113   for i=1:nxx
a.   x = (i-1)*dx;
b.   for j = 1:nny
c.   y = (j-1)*dy;
d.   coord(k,1) = x;
e.   coord(k,2) = y;
f.   k = k+1;
g.   end;
114   end;
115   %
116   %      condição inicial
117   %
118   ini = fix((nx*nny)/3);
119   jni = fix(nny/6);
120   fim = 2*ini;
121   u0 = zeros(nn,1);
122   for i = ini-jni:nny:fim
123   for j = i:1:i+jni
a.   u0(j)=0.1;
124   end;
125   end;
126   mm = max(u0);
127   %
128   %      submatrizes de rigidez
129   %
130   %      (fi-j)*(fi-i)
131   %
132   mfi=(dxy/24)*[2 1 1; 1 2 1; 1 1 2];
133   %
134   %      [(dfi-j/dx)*fi-i] e [(dfi-j/dy)*fi-i]
135   %      para os triangulos inferiores e superiores
136   %

```

```

137     mdx_i=(dy/6)*[-1  1  0;-1  1  0;-1  1  0];
138     mdx_s=(dy/6)*[ 1 -1  0; 1 -1  0; 1 -1  0];
139     %
140     mdy_i=(dx/6)*[-1  0  1;-1  0  1;-1  0  1];
141     mdy_s=(dx/6)*[ 1  0 -1; 1  0 -1; 1  0 -1];
142     %
143     %      alpha * (grad(fi-j) | grad(fi-i) )
144     %
145     mg1=[dxdy + dydx  -dydx  -dxdy; -dydx  dydx  0; -dxdy  0
dxdy];
146     %
147     %      preparacao dos parametros que independem das
coordenadas
148     %
149     crs  = mdt*sgu;                                % coef. (fi-j | fi-i)
150     cgs1 = mdt*a0;                                % coef. (grad fi-j | grad
fi-i)
151     vpx  = mdt*v1;                                % coef. V-1 dt/2 (dfi-
j/dx | fi-i)
152     vpy  = v2*mdt;                                % coef. V-2 dt/2 (dfi-
j/dy | fi-i)
153     %
154     %      montagem das matrizes do sistema
155     %
156     A = sparse(nn,nn);
157     B = sparse(nn,nn);
158     d = zeros(nn,1);
159     uar= zeros(npt,1);
160     %
161     for iel=1:ntr;
162     for il=1:3
a. ig=malha(iel,il);
b. if ig~=0;
    i. for jl=1:3;
    ii. jg=malha(iel,jl);
    iii. if jg~=0;
        1. if mod(iel,2)==1
163     A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs)*mfi(il,jl)+cgs1*mg1(il,jl)+vpx
*mdx_i(il,jl)+vpy*mdy_i(il,jl);
        1. B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs)*mfi(il,jl)-
cgs1*mg1(il,jl)-vpx*mdx_i(il,jl)-
vpy*mdy_i(il,jl);
        2. else
164     A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs)*mfi(il,jl)+cgs1*mg1(il,jl)+vpx
*mdx_s(il,jl)+vpy*mdy_s(il,jl);
        1. B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs)*mfi(il,jl)-
cgs1*mg1(il,jl)-vpx*mdx_s(il,jl)-
vpy*mdy_s(il,jl);
        2. end;
    ii. end;
    iii. end;
b. end;
165     end;
166     end;
167     %
168     %      inclusao do termo independente.
169     %
170     t = 0;
171     f = Co*exp(-k*t);

```

```

172     for i = ini-jni:nny:fim
173     for j = i:1:i+jni
174         a. d(j) = f*dx*dy;
175     end;
176     end;
177     %r = rcond(full(A));
178     %
179     %           Fatoracao L U da matriz de rigidez
180     %
181     [ll uu] = lu(A);
182     %
183     %   grafico do vetor condicao inicial
184     %
185     subplot(2,2,1)
186     trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),u0),title('Cenario
187     2: t = 0'),view(0,90),colorbar,shading interp;
188     ti = zeros(npt,1);
189     %
190     %   resolucao dos sucessivos sistemas.
191     %
192     noar = nx*ny/2
193     for it = 1:npt
194         ti(it) = it*dt;
195         t = t + it*dt + mdt;
196         uar(it) = u0(noar);
197         f = Co*exp(-k*t);
198         for i = ini-jni:nny:fim
199             for j = i:1:i+jni
200                 d(j) = f*dx*dy;
201             end;
202         end;
203         ys = ll\ (B*u0+d);
204         s = uu\ys;
205         %
206         %           visualizacao
207         %
208         if (it==200)
209             subplot(2,2,2)
210             trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),s),title('Cenario
211             2: t = 10h'),view(0,90),colorbar,shading
212             interp;
213         end;
214         if (it==500)
215             subplot(2,2,3)
216             trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),s),title('Cenario
217             2: t = 25h'),view(0,90),colorbar,shading
218             interp;%axis([0 xmax 0 ymax 0 mm]);
219         end;
220         if (it==1000)
221             subplot(2,2,4)
222             trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),s),title('Cenario
223             2: t = 50h'),view(0,90),colorbar,shading
224             interp;%axis([0 xmax 0 ymax 0 mm]);
225         end;
226         u0=s;
227     end;
228     figure(2)
229     grid on, %colormap gray,
230     plot(ti,uar);

```


214 etime(clock,t0)

2 CÓDIGOS PARA MATHEMATICA®

Os códigos a seguir foram implantados no Mathematica®, para o cálculo das integrais dadas pelos produtos internos que aparecem nas equações.

Submatriz – m – superior

```
ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
1. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
2. ClearAll[GI11,GI12,GI13,GI21,GI22,GI23,GI31,GI32,GI33];
3. ClearAll[FI111,FI112,FI113,FI121,FI122,FI123,FI131,FI132,FI133];
4. ClearAll[HY111,HY112,HY113,HY121,HY122,HY123,HY131,HY132,HY133];
5. F1[x_,y_]=-1+x/dx+y/dy;
6. F2[x_,y_]=1-x/dx;
7. F3[x_,y_]=1-y/dy;
8. xmin=0;
9. xmax=dx;
10. ymin=-dy/dx (x-dx);
11. ymax=dy;
12. G11[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F1[x,y],y];
13. HY11[x_]=Simplify[G11[x,ymax]-G11[x,ymin]];
14. GI11[x_]=Integrate[HY11[x],x];
15. HY111=Simplify[GI11[xmax]-GI11[xmin]];
16. G12[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F2[x,y],y];
17. HY12[x_]=Simplify[G12[x,ymax]-G12[x,ymin]];
18. GI12[x_]=Integrate[HY12[x],x];
19. HY112=Simplify[GI12[xmax]-GI12[xmin]];
20. G13[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F3[x,y],y];
21. HY13[x_]=Simplify[G13[x,ymax]-G13[x,ymin]];
22. GI13[x_]=Integrate[HY13[x],x];
23. HY113=Simplify[GI13[xmax]-GI13[xmin]];
24. G21[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F1[x,y],y];
25. HY21[x_]=Simplify[G21[x,ymax]-G21[x,ymin]];
26. GI21[x_]=Integrate[HY21[x],x];
27. HY121=Simplify[GI21[xmax]-GI21[xmin]];
28. G22[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F2[x,y],y];
29. HY22[x_]=Simplify[G22[x,ymax]-G22[x,ymin]];
30. GI22[x_]=Integrate[HY22[x],x];
31. HY122=Simplify[GI22[xmax]-GI22[xmin]];
32. G23[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F3[x,y],y];
33. HY23[x_]=Simplify[G23[x,ymax]-G23[x,ymin]];
34. GI23[x_]=Integrate[HY23[x],x];
```

```

35. HY123=Simplify[GI23[xmax]-GI23[xmin]];
36. G31[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F1[x,y],y];
37. HY31[x_]=Simplify[G31[x,ymax]-G31[x,ymin]];
38. GI31[x_]=Integrate[HY31[x],x];
39. HY131=Simplify[GI31[xmax]-GI31[xmin]];
40. G32[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F2[x,y],y];
41. HY32[x_]=Simplify[G32[x,ymax]-G32[x,ymin]];
42. GI32[x_]=Integrate[HY32[x],x];
43. HY132=Simplify[GI32[xmax]-GI32[xmin]];
44. G33[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F3[x,y],y];
45. HY33[x_]=Simplify[G33[x,ymax]-G33[x,ymin]];
46. GI33[x_]=Integrate[HY33[x],x];
47. HY133=Simplify[GI33[xmax]-GI33[xmin]];
48. TRID1={HY111, HY112, HY113};
49. TRID2={HY121, HY122, HY123};
50. TRID3={HY131, HY132, HY133};
51. MAT1=MatrixForm[{TRID1, TRID2, TRID3}]

```

Submatriz - m -inferior

```

1. ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
2. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
3. ClearAll[GI11,GI12,GI13,GI21,GI22,GI23,GI31,GI32,GI33];
4. ClearAll[FI111,FI112,FI113,FI121,FI122,FI123,FI131,FI132,FI133];
5. ClearAll[HY111,HY112,HY113,HY121,HY122,HY123,HY131,HY132,HY133];
6. F1[x_,y_]=1-x/dx-y/dy;
7. F2[x_,y_]=x/dx;
8. F3[x_,y_]=y/dy;
9. xmin=0;
10. xmax=dx;
11. ymin=0;
12. ymax=-dy/dx (x - dx);
13. G11[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F1[x,y],y];
14. HY11[x_]=Simplify[G11[x,ymax]-G11[x,ymin]];
15. GI11[x_]=Integrate[HY11[x],x];
16. HY111=Simplify[GI11[xmax]-GI11[xmin]];
17. G12[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F2[x,y],y];
18. HY12[x_]=Simplify[G12[x,ymax]-G12[x,ymin]];
19. GI12[x_]=Integrate[HY12[x],x];
20. HY112=Simplify[GI12[xmax]-GI12[xmin]];
21. G13[x_,y_]=Integrate[F1[x,y] F3[x,y],y];
22. HY13[x_]=Simplify[G13[x,ymax]-G13[x,ymin]];
23. GI13[x_]=Integrate[HY13[x],x];
24. HY113=Simplify[GI13[xmax]-GI13[xmin]];
25. G21[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F1[x,y],y];
26. HY21[x_]=Simplify[G21[x,ymax]-G21[x,ymin]];
27. GI21[x_]=Integrate[HY21[x],x];
28. HY121=Simplify[GI21[xmax]-GI21[xmin]];
29. G22[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F2[x,y],y];
30. HY22[x_]=Simplify[G22[x,ymax]-G22[x,ymin]];
31. GI22[x_]=Integrate[HY22[x],x];

```

```

32. HY122=Simplify[GI22[xmax]-GI22[xmin]];
33. G23[x_,y_]=Integrate[F2[x,y] F3[x,y],y];
34. HY23[x_]=Simplify[G23[x,ymax]-G23[x,ymin]];
35. GI23[x_]=Integrate[HY23[x],x];
36. HY123=Simplify[GI23[xmax]-GI23[xmin]];
37. G31[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F1[x,y],y];
38. HY31[x_]=Simplify[G31[x,ymax]-G31[x,ymin]];
39. GI31[x_]=Integrate[HY31[x],x];
40. HY131=Simplify[GI31[xmax]-GI31[xmin]];
41. G32[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F2[x,y],y];
42. HY32[x_]=Simplify[G32[x,ymax]-G32[x,ymin]];
43. GI32[x_]=Integrate[HY32[x],x];
44. HY132=Simplify[GI32[xmax]-GI32[xmin]];
45. G33[x_,y_]=Integrate[F3[x,y] F3[x,y],y];
46. HY33[x_]=Simplify[G33[x,ymax]-G33[x,ymin]];
47. GI33[x_]=Integrate[HY33[x],x];
48. HY133=Simplify[GI33[xmax]-GI33[xmin]];
49. TRID1={HY111, HY112, HY113};
50. TRID2={HY121, HY122, HY123};
51. TRID3={HY131, HY132, HY133};
52. MAT1=MatrixForm[{TRID1, TRID2, TRID3}]

```

Submatriz- n - superior

```

1. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
2. ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
3. ClearAll[H11,H12,H13,H21,H22,H23,H31,H32,H33];
4. ClearAll[F111,F112,F113,F121,F122,F123,F131,F132,F133];

5. ClearAll[GRAF1,GRAF2,GRAF3,GRTF1,GRTF2,GRTF3];
6. ClearAll[ymin,ymax,xmin,xmax,TRID1,TRID2,TRID3,Mat1];

7. GRAF1[x_,y_]={D[x/dx+y/dy-1,x],D[x/dx+y/dy-1,y]};
8. GRAF2[x_,y_]={D[1-x/dx,x],D[1-x/dx,y]};
9. GRAF3[x_,y_]={D[1-y/dy,x],D[1-y/dy,y]};
10. GRTF1[x_,y_]={{D[x/dx+y/dy-1,x]},{D[x/dx+y/dy-1,y]}};
11. GRTF2[x_,y_]={{D[1-x/dx,x]},{D[1-x/dx,y]}};
12. GRTF3[x_,y_]={{D[1-y/dy,x]},{D[1-y/dy,y]}};
13. xmin=0;
14. xmax=dx;
15. ymin=-dy/dx (x-dx);
16. ymax=dy;
17. G11[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF1[x,y]),y];
18. G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
19. H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
20. FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
21. G12[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF2[x,y]),y];
22. G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
23. H112[x_]=Integrate[G112[x],x];

```

```

24.    FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
25.    G13[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF3[x,y]),y]
;
26.    G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
27.    H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
28.    FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
29.    G21[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF1[x,y]),y]
;
30.    G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
31.    H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
32.    FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
33.    G22[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF2[x,y]),y]
;
34.    G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
35.    H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
36.    FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
37.    G23[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF3[x,y]),y]
;
38.    G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
39.    H123[x_]=Integrate[G123[x],x];
40.    FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
41.    G31[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF1[x,y]),y]
;
42.    G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
43.    H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
44.    FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
45.    G32[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF2[x,y]),y]
;
46.    G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];
47.    H132[x_]=Integrate[G132[x],x];
48.    FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
49.    G33[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF3[x,y]),y]
;
50.    G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
51.    H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
52.    FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];
53.    TRID1={FI111,FI112,FI113};
54.    TRID2={FI121,FI122,FI123};
55.    TRID3={FI131,FI132,FI133};
56.    MATRIZ1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz – n - inferior

```

1. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
2. ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
3. ClearAll[H11,H12,H13,H21,H22,H23,H31,H32,H33];
4. ClearAll[F111,F112,F113,F121,F122,F123,F131,F132,F133];
5. ClearAll[GRAF1,GRAF2,GRAF3,GRTF1,GRTF2,GRTF3];
6. ClearAll[ymin,ymax,xmin,xmax,TRID1,TRID2,TRID3,Mat1]
;
7. GRAF1[x_,y_]={D[1-x/dx-y/dy,x],D[1-x/dx-y/dy,y]};

```

```

8. GRAF2[x_,y_]={D[x/dx,x],D[x/dx,y]};
9. GRAF3[x_,y_]={D[y/dy,x],D[y/dy,y]};
10.   GRTF1[x_,y_]={{D[1-x/dx-y/dy,x]},{D[1-x/dx-
    y/dy,y]}};
11.   GRTF2[x_,y_]={{D[x/dx,x]},{D[x/dx,y]}};
12.   GRTF3[x_,y_]={{D[y/dy,x]},{D[y/dy,y]}};
13.   xmin=0;
14.   xmax=dx;
15.   ymin=0;
16.   ymax=-dy/dx (x-dx);
17.   G11[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF1[x,y])
    ,y];
18.   G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
19.   H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
20.   FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
21.   G12[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF2[x,y]),y]
    ;
22.   G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
23.   H112[x_]=Integrate[G112[x],x];
24.   FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
25.   G13[x_,y_]=Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF3[x,y]),y]
    ;
26.   G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
27.   H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
28.   FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
29.   G21[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF1[x,y]),y]
    ;
30.   G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
31.   H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
32.   FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
33.   G22[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF2[x,y]),y]
    ;
34.   G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
35.   H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
36.   FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
37.   G23[x_,y_]=Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF3[x,y]),y]
    ;
38.   G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
39.   H123[x_]=Integrate[G123[x],x];
40.   FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
41.   G31[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF1[x,y]),y]
    ;
42.   G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
43.   H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
44.   FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
45.   G32[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF2[x,y]),y]
    ;
46.   G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];
47.   H132[x_]=Integrate[G132[x],x];
48.   FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
49.   G33[x_,y_]=Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF3[x,y]),y]
    ;
50.   G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
51.   H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
52.   FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];

```

```

53.    TRID1={FI111,FI112,FI113};
54.    TRID2={FI121,FI122,FI123};
55.    TRID3={FI131,FI132,FI133};
56.    MATRIZ1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz - p - superior

```

56    ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
57    ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
58    ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
59    ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G1
32,G133];
60    ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H131,H1
32,H133];
61    F1[x_,y_]=x/dx+y/dy-1;
62    F2[x_,y_]=1-x/dx;
63    F3[x_,y_]=1-y/dy;
64    DF1x[x_,y_]=D[F1[x,y],x];
65    DF2x[x_,y_]=D[F2[x,y],x];
66    DF3x[x_,y_]=D[F3[x,y],x];
67    xmin=0;
68    xmax=dx;
69    ymin=-dy/dx (x-dx);
70    ymax=dy;
71    G11[x_,y_]=Integrate[DF1x[x_,y_] F1[x,y],y];
72    G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
73    H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
74    FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
75    G12[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F1[x,y],y];
76    G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
77    H112[x_]=Integrate[G112[x],x];
78    FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
79    G13[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_] F1[x,y],y];
80    G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
81    H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
82    FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
83    G21[x_,y_]=Integrate[DF1x[x_,y_] F2[x,y],y];
84    G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
85    H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
86    FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
87    G22[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F2[x,y],y];
88    G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
89    H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
90    FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
91    G23[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_] F2[x,y],y];
92    G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
93    H123[x_]=Integrate[G123[x],x];
94    FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
95    G31[x_,y_]=Integrate[DF1x[x_,y_] F3[x,y],y];
96    G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
97    H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
98    FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
99    G32[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F3[x,y],y];
100   G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];

```

```

101      H132[x_]=Simplify[Integrate[G132[x],x]];
102      FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
103      G33[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_] F3[x,y],y];
104      G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
105      H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
106      FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];
107      TRID1={FI111,FI112,FI113};
108      TRID2={FI121,FI122,FI123};
109      TRID3={FI131,FI132,FI133};
      Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz - p -inferior

```

1. ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
2. ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
3. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
4. ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G13
   3];
5. ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H131,H132,H13
   3];
6. F1[x_,y_]=1-x/dx-y/dy;
7. F2[x_,y_]=x/dx;
8. F3[x_,y_]=y/dy;
9. DF1x[x_,y_]=D[F1[x,y],x];
10.   DF2x[x_,y_]=D[F2[x,y],x];
11.   DF3x[x_,y_]=D[F3[x,y],x];
12.   xmin=0;
13.   xmax=dx;
14.   ymin=0;
15.   ymax=-dy/dx (x-dx);
16.   G11[x_,y_]=Integrate[ DF1x[x_,y_] F1[x,y],y];
17.   G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
18.   H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
19.   FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
20.   G12[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F1[x,y],y];
21.   G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
22.   H112[x_]=Integrate[G112[x],x];
23.   FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
24.   G13[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_]F1[x,y],y];
25.   G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
26.   H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
27.   FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
28.   G21[x_,y_]=Integrate[DF1x[x_,y_] F2[x,y],y];
29.   G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
30.   H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
31.   FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
32.   G22[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F2[x,y],y];
33.   G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
34.   H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
35.   FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
36.   G23[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_] F2[x,y],y];
37.   G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
38.   H123[x_]=Integrate[G123[x],x];

```

```

39.      FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
40.      G31[x_,y_]=Integrate[DF1x[x_,y_] F3[x,y],y];
41.      G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
42.      H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
43.      FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
44.      G32[x_,y_]=Integrate[DF2x[x_,y_] F3[x,y],y];
45.      G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];
46.      H132[x_]=Simplify[Integrate[G132[x],x]];
47.      FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
48.      G33[x_,y_]=Integrate[DF3x[x_,y_] F3[x,y],y];
49.      G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
50.      H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
51.      FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];
52.      TRID1={FI111,FI112,FI113};
53.      TRID2={FI121,FI122,FI123};
54.      TRID3={FI131,FI132,FI133};
55.      Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz - q - superior

```

1.      ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
2.      ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
3.      ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,
4.      G33];
5.      ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G
6.      131,G132,G133];
7.      ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H
8.      131,H132,H133];
9.      F1[x_,y_]=x/dx-y/dy-1;
10.     F2[x_,y_]=1-x/dx;
11.     F3[x_,y_]=1-y/dy;
12.     DF1y=D[F1[x,y],y];
13.     DF2y=D[F2[x,y],y];
14.     DF3y=D[F3[x,y],y];
15.     xmin=0;
16.     xmax=dx;
17.     ymin=-dy/dx (x-dx);
18.     ymax=dy;
19.     G11[x_,y_]=Integrate[ DF1y F1[x,y],y];
20.     G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
21.     H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
22.     FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
23.     G12[x_,y_]=Integrate[ DF2y F1[x,y],y];
24.     G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
25.     H112[x_]=Integrate[G112[x],x];
26.     FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
27.     G13[x_,y_]=Integrate[ DF3y F1[x,y],y];
28.     G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
29.     H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
30.     FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
31.     G21[x_,y_]=Integrate[ DF1y F2[x,y],y];
32.     G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
33.     H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
34.     FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];

```



```

32.      G22[x_,y_]=Integrate[ DF2y F2[x,y],y];
33.      G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
34.      H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
35.      FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
36.      G23[x_,y_]=Integrate[DF3y F2[x,y],y];
37.      G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
38.      H123[x_]=Integrate[G123[x],x];
39.      FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
40.      G31[x_,y_]=Integrate[ DF1y F3[x,y],y];
41.      G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
42.      H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
43.      FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
44.      G32[x_,y_]=Integrate[ DF2y F3[x,y],y];
45.      G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];
46.      H132[x_]=Simplify[Integrate[G132[x],x]];
47.      FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
48.      G33[x_,y_]=Integrate[ DF3y F3[x,y],y];
49.      G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
50.      H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
51.      FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];
52.      TRID1={FI111,FI112,FI113};
53.      TRID2={FI121,FI122,FI123};
54.      TRID3={FI131,FI132,FI133};
      Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz - q - inferior

```

1. ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
2. ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
3. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
4. ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
5. ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H131,H132,H133];
6. F1[x_,y_]=1-x/dx-y/dy;
7. F2[x_,y_]=x/dx;
8. F3[x_,y_]=y/dy;
9. DF1y=D[F1[x,y],y];
10.  DF2y=D[F2[x,y],y];
11.  DF3y=D[F3[x,y],y];
12.  xmin=0;
13.  xmax=dx;
14.  ymin=0;
15.  ymax=-dy/dx (x-dx);
16.  G11[x_,y_]=Integrate[ DF1y F1[x,y],y];
17.  G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
18.  H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
19.  FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
20.  G12[x_,y_]=Integrate[ DF2y F1[x,y],y];
21.  G112[x_]=G12[x,ymax]-G12[x,ymin];
22.  H112[x_]=Integrate[G112[x],x];
23.  FI112=Simplify[H112[xmax]-H112[xmin]];
24.  G13[x_,y_]=Integrate[ DF3y F1[x,y],y];

```

```

25.    G113[x_]=G13[x,ymax]-G13[x,ymin];
26.    H113[x_]=Integrate[G113[x],x];
27.    FI113=Simplify[H113[xmax]-H113[xmin]];
28.    G21[x_,y_]=Integrate[ DF1y F2[x,y],y];
29.    G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
30.    H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
31.    FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
32.    G22[x_,y_]=Integrate[ DF2y F2[x,y],y];
33.    G122[x_]=G22[x,ymax]-G22[x,ymin];
34.    H122[x_]=Integrate[G122[x],x];
35.    FI122=Simplify[H122[xmax]-H122[xmin]];
36.    G23[x_,y_]=Integrate[DF3y F2[x,y],y];
37.    G123[x_]=G23[x,ymax]-G23[x,ymin];
38.    H123[x_]=Integrate[G123[x],x];
39.    FI123=Simplify[H123[xmax]-H123[xmin]];
40.    G31[x_,y_]=Integrate[ DF1y F3[x,y],y];
41.    G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
42.    H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
43.    FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
44.    G32[x_,y_]=Integrate[ DF2y F3[x,y],y];
45.    G132[x_]=G32[x,ymax]-G32[x,ymin];
46.    H132[x_]=Simplify[Integrate[G132[x],x]];
47.    FI132=Simplify[H132[xmax]-H132[xmin]];
48.    G33[x_,y_]=Integrate[ DF3y F3[x,y],y];
49.    G133[x_]=G33[x,ymax]-G33[x,ymin];
50.    H133[x_]=Integrate[G133[x],x];
51.    FI133=Simplify[H133[xmax]-H133[xmin]];
52.    TRID1={FI111,FI112,FI113};
53.    TRID2={FI121,FI122,FI123};
54.    TRID3={FI131,FI132,FI133};
55.    Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz – f - superior

```

1.    ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
2.    ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
3.    ClaerAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,
    G33];
4.    ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G
    131,G132,G133];
5.    ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H
    131,H132,H133];
6.    F1[x_,y_]=-1+x/dx+y/dy;
7.    F2[x_,y_]=1-x/dx;
8.    F3[x_,y_]=1-y/dy;
9.    F1t[t_]=C0 Exp[-k t];
10.   xmin=0;
11.   xmax=dx;
12.   ymin=-dy/dx (x-dx);
13.   ymax=dy;
14.   G11[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F1[x,y],y];
15.   G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
16.   H111[x_]=Integrate[G111[x],x];

```

```

17.          FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
18.          G21[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F2[x,y],y];
19.          G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
20.          H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
21.          FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
22.          G31[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F3[x,y],y];
23.          G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
24.          H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
25.          FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
26.          TRID1={FI111};
27.          TRID2={FI121};
28.          TRID3={FI131};
      Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```

Submatriz - f - inferior

```

1. ClearAll[F1,F2,F3,xmax,xmin,ymin,ymax];
2. ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
3. ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
4. ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
5. ClearAll[H111,H112,H113,H121,H122,H123,H131,H132,H133];
6. F1[x_,y_]=1-x/dx-y/dy;
7. F2[x_,y_]=x/dx;
8. F3[x_,y_]=y/dy;
9. F1t[t_]=C0 Exp[-k t];
10.  xmin=0;
11.  xmax=dx;
12.  ymin=0;
13.  ymax=-dy/dx (x-dx);
14.  G11[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F1[x,y],y];
15.  G111[x_]=G11[x,ymax]-G11[x,ymin];
16.  H111[x_]=Integrate[G111[x],x];
17.  FI111=Simplify[H111[xmax]-H111[xmin]];
18.  G21[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F2[x,y],y];
19.  G121[x_]=G21[x,ymax]-G21[x,ymin];
20.  H121[x_]=Integrate[G121[x],x];
21.  FI121=Simplify[H121[xmax]-H121[xmin]];
22.  G31[x_,y_]=Integrate[ F1t[t] F3[x,y],y];
23.  G131[x_]=G31[x,ymax]-G31[x,ymin];
24.  H131[x_]=Integrate[G131[x],x];
25.  FI131=Simplify[H131[xmax]-H131[xmin]];
26.  TRID1={FI111};
27.  TRID2={FI121};
28.  TRID3={FI131};
29.  Mat1=MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]

```