

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS - *CAMPUS* SOROCABA**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA PARA A SUSTENTABILIDADE**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA, QUÍMICA E MATEMÁTICA**  
**LICENCIATURA EM FÍSICA**

**LUDMILA VITÓRIA RIBEIRO ROCUMBA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A**  
**DISPERSÃO DE POLUENTES: SIMULAÇÕES EM MEIOS**  
**AQUÁTICOS E AÉREOS**

Sorocaba-SP

2024

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS - *CAMPUS* SOROCABA**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA PARA A SUSTENTABILIDADE**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA, QUÍMICA E MATEMÁTICA**  
**LICENCIATURA EM FÍSICA**

**LUDMILA VITÓRIA RIBEIRO ROCUMBA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A DISPERSÃO  
DE POLUENTES: SIMULAÇÕES EM MEIOS AQUÁTICOS E AÉREOS**

Monografia apresentada ao Departamento de Física, Química e Matemática da Universidade Federal de São Carlos – Campus Sorocaba, para obtenção do título de Licenciada em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Graciele P. Silveira

Sorocaba-SP

2024

Rocumba, Ludmila Vitória Ribeiro

MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS  
PARA A DISPERSÃO DE POLUENTES: Simulações em  
meios aquáticos e aéreos / Ludmila Vitória Ribeiro  
Rocumba -- 2024.  
80f.

TCC (Graduação) - Universidade Federal de São Carlos,  
campus Sorocaba, Sorocaba  
Orientador (a): Graciele Paraguaia Silveira  
Banca Examinadora: Raphael de Oliveira Garcia, Renato  
Fernandes Cantão  
Bibliografia

1. Equação da difusão-advecção. 2. Equações de Euler.  
3. Simulações computacionais. I. Rocumba, Ludmila  
Vitória Ribeiro. II. Título.

Ficha catalográfica desenvolvida pela Secretaria Geral de Informática  
(SIn)

DADOS FORNECIDOS PELO AUTOR

Bibliotecário responsável: Maria Aparecida de Lourdes Mariano -  
CRB/8 6979



FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
COORDENAÇÃO DO CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA - SOROCABA - CCFL-So/CCTS  
Rod. João Leme dos Santos km 110 - SP-264, s/n - Bairro Itinga, Sorocaba/SP, CEP 18052-780  
Telefone: (15) 32298859 - <http://www.ufscar.br>

DP-TCC-FA nº 7/2024/CCFL-So/CCTS

**Graduação: Defesa Pública de Trabalho de Conclusão de Curso**  
**Folha Aprovação (GDP-TCC-FA)**  
**FOLHA DE APROVAÇÃO**

**LUDMILA VITÓRIA RIBEIRO ROCUMBA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A DISPERSÃO DE POLUENTES:  
SIMULAÇÕES EM MEIOS AQUÁTICOS E AÉREOS**

**Trabalho de Conclusão de Curso**

**Universidade Federal de São Carlos - Campus Sorocaba**

Sorocaba, 5 de dezembro de 2024

**ASSINATURAS E CIÊNCIAS**

Cargo/Função	Nome Completo
Orientador	Profa. Dra. Graciele Paraguaia Silveira
Membro da Banca 1	Prof. Dr. Renato Fernandes Cantão
Membro da Banca 2	Prof. Dr. Raphael de Oliveira Garcia



Documento assinado eletronicamente por **Graciele Paraguaia Silveira, Docente**, em 05/12/2024, às 11:13, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Renato Fernandes Cantao, Docente**, em 05/12/2024, às 11:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.ufscar.br/autenticacao>, informando o código verificador **1667721** e o código CRC **FEAEDC1F**.

**Referência:** Caso responda a este documento, indicar expressamente o Processo nº 23112.037131/2024-66

SEI nº 1667721

Modelo de Documento: Grad: Defesa TCC: Folha Aprovação, versão de 02/Agosto/2019

Documento assinado digitalmente  
**gov.br** RAPHAEL DE OLIVEIRA GARCIA  
Data: 05/12/2024 12:21:09-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

*“Na vida, não existe nada a temer, mas a entender”.*

*(Marie Curie, 1867-1934)*

## **Agradecimentos**

Agradeço especialmente a minha família pelo imenso apoio e incentivo aos estudos, e tantas outras coisas, que tive por toda minha vida. Agradeço, portanto, ao meu pai, Odair, por todas as horas e esforços dedicados à minha formação. Agradeço à minha mãe, Vilma, por toda ajuda e carinho. Por fim, agradeço à minha irmã, Letícia, que sempre foi como um vislumbre do meu futuro e, conseqüentemente, minha maior fonte de encorajamento e inspiração. Agradeço também por todos os “pitacos” dados por ela durante a elaboração desse e outros trabalhos.

Agradeço aos meus amigos pela paciência e consideração que mantiveram apesar de todos os meus sumiços. Agradeço à Profa. Dra. Graciele P. Silveira pelo excelente trabalho como orientadora e por todo apoio durante a realização deste trabalho e das iniciações científicas.

Agradeço aos professores Dr. Renato F. Cantão e Dr. Raphael de O. Garcia por aceitarem participar desta banca.

Agradeço, por último, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de iniciação científica que deu base à parte deste trabalho.

## Resumo

O crescente impacto ambiental causado por atividades humanas, decorrentes da industrialização e da urbanização, junto ao descarte incorreto de substâncias, tornam necessário aprimorar a compreensão acerca da dispersão de poluentes, para que assim seja possível mitigar seus efeitos nocivos aos ecossistemas. Este Trabalho de Conclusão de Curso teve como objetivo estudar o comportamento de poluentes em meios aquáticos e aéreos, utilizando a modelagem matemática como ferramenta. Para isto, foram empregadas a Equação Diferencial Parcial da Difusão-Advecção e as Equações de Euler. A Equação da Difusão-Advecção foi tratada numericamente pelo método de Diferenças Finitas, a saber, a aproximação para a primeira derivada do tipo diferença avançada para a discretização temporal, esquema UpWind para o termo advectivo e a aproximação centrada de segunda ordem para a discretização espacial do termo difusivo. Já as Equações de Euler foram discretizadas a partir do método de volume finito Lax-Friedrichs, modificado para considerar o fluxo numérico. Ambos os modelos foram implementados computacionalmente por meio da linguagem Python e, a partir de simulações realizadas, foram analisados os comportamentos dos poluentes ao longo do tempo. Espera-se que os resultados de simulações como estas possam ser usados para fornecer informações para a criação de políticas públicas e medidas preventivas que visam mitigar os danos causados devido a presença de poluentes, contribuindo, portanto, para a preservação do meio ambiente.

**Palavras-chave:** Poluentes. Equações de Euler. Equação da Difusão-Advecção. Métodos Numéricos. Simulações Computacionais.

## Abstract

The growing environmental impact caused by human activities, stemming from industrialization and urbanization, along with the improper disposal of substances, necessitates enhancing the understanding of pollutant dispersion to mitigate their harmful effects on ecosystems. This undergraduate thesis aimed to study the behavior of pollutants in aquatic and aerial environments using mathematical modeling as a tool. For this purpose, the Partial Differential Equation of Advection-Diffusion and the Euler Equations were employed. The Advection-Diffusion Equation was numerically handled using the Finite Difference method, with a forward difference approximation for the temporal discretization, an Upwind scheme for the advective term, and a second-order centered approximation for the spatial discretization of the diffusive term. Meanwhile, the Euler Equations were discretized using the Lax-Friedrichs method, modified to account for numerical flux. Both models were implemented computationally using the Python programming language, and simulations were performed to analyze the pollutant's behavior over time. It is expected that results from simulations like these can provide information for the creation of public policies and preventive measures aimed at mitigating the damage caused by pollutants, thereby contributing to environmental preservation.

**Keywords:** Pollutants. Euler Equations. Advection-Diffusion Equation. Numerical Methods. Computational Simulations.

# Lista de Figuras

1.1	Fumaça das queimadas que ocorreram em 2024 no estado de São Paulo. . . . .	18
1.2	Céu poluído na cidade de Carapicuíba-SP. . . . .	19
1.3	Peixes mortos no trecho de Tanquã. . . . .	19
2.1	Difusão de uma mancha de corante no tempo e no espaço. . . . .	28
2.2	Advecção de uma mancha de corante no tempo e no espaço. . . . .	29
2.3	Vazões de massa para o volume de controle. . . . .	32
2.4	Tensões sobre um elemento de fluido na direção $x$ . . . . .	34
3.1	Gráfico da solução analítica e numérica para o tempo final. . . . .	50
3.2	Gráfico da diferença entre a solução analítica e numérica para $t = 0.5$ . . . . .	51
4.1	Gráficos das soluções numéricas para o cenário 1. . . . .	59
4.2	Gráficos das soluções numéricas para o cenário 2. . . . .	61
4.3	Aproximação na mancha do poluente do cenário 2 para o tempo inicial e $t = 10$ dias . . . . .	61
4.4	Gráficos das soluções numéricas para o cenário 3. . . . .	62
4.5	Gráficos das soluções numéricas para o cenário 4. . . . .	63
4.6	Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 1. . . . .	65
4.7	Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 1. . . . .	66
4.8	Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 2. . . . .	66
4.9	Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 2. . . . .	67
4.10	Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 3. . . . .	68
4.11	Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 3. . . . .	68

4.12	Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 4.	69
4.13	Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 4. . . . .	70
4.14	Localização do Bioma Pantanal. . . . .	71
4.15	Mapa indicando as cidades de Corumbá-MS e São José dos Campos-SP. . . . .	71
4.16	Captura de tela indicando a distância entre as cidades de Corumbá-MS e São José dos Campos-SP. . . . .	72
4.17	Captura de tela indicando os focos de incêndio do dia 20 de junho de 2024, entre os estados de Mato Grosso do Sul e São Paulo. . . . .	72
4.18	Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 5.	73
4.19	Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 5. . . . .	74

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>13</b>
<b>1 Poluição</b>	<b>16</b>
1.1 Poluição do Ar . . . . .	21
1.2 Poluição da Água . . . . .	22
<b>2 Dinâmica dos Fluidos</b>	<b>24</b>
2.1 Modelagem Matemática . . . . .	24
2.2 Equação Diferencial Parcial da Difusão-Advecção . . . . .	26
2.2.1 O fenômeno da difusão e da advecção . . . . .	27
2.3 Equações de Euler . . . . .	29
2.3.1 Equação da Continuidade . . . . .	31
2.3.2 Equação da Quantidade de Movimento . . . . .	33
2.3.3 Equação da Energia . . . . .	37
<b>3 Métodos Numéricos</b>	<b>38</b>
3.1 O Método de Diferenças Finitas . . . . .	38
3.1.1 Aproximações para a primeira derivada . . . . .	39
3.1.2 Aproximação para a segunda derivada . . . . .	43
3.1.3 A Equação do Calor como exemplo . . . . .	44
3.2 O Método de Lax-Friedrichs . . . . .	51
3.3 Discretização das equações . . . . .	52
3.3.1 O Esquema UpWind . . . . .	53
3.3.2 Discretização da Equação da Difusão-Advecção . . . . .	53
3.3.3 Discretização das Equações de Euler . . . . .	56

<b>4</b>	<b>Simulações e Resultados</b>	<b>58</b>
4.1	Simulações para a Equação da Difusão-Advecção . . . . .	58
4.2	Simulações e Resultados para as Equações de Euler . . . . .	64
4.2.1	Queimadas no Pantanal . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>75</b>
	<b>Referências</b>	<b>77</b>

# Introdução

O acelerado desenvolvimento econômico e a urbanização acarretou em uma maior demanda, produção e consumo de bens. Em conjunto houve a intensificação das atividades agrícolas, industriais e domésticas, resultando no crescimento exorbitante na geração de resíduos. Estes resíduos são maléficos ao meio ambiente e não passam pelos processos corretos de descarte, impactando os ecossistemas e a saúde humana.

A poluição decorrente de tais atividades se apresenta como um grave problema, muitas vezes causando prejuízos para a comunidade, fauna e flora locais. O não tratamento da água utilizada, que se torna contaminada por diversos compostos e produtos, e o seu despejo inadequado acarretam a contaminação do solo, rios, lagos e oceanos, além da degradação da vida presente nesses lugares. Devido a processos ambientais naturais esses compostos também contaminam o solo, prejudicando principalmente a vegetação, o que, por sua vez, pode resultar no desequilíbrio ecológico da região.

Junto a isso, as queimadas, o desmatamento, a queima de combustíveis fósseis e a intensificação das indústrias têm aumentado os níveis de poluição atmosférica, tanto em escala local, como global. Porém, estas podem afetar mais do que a atmosfera, pois quando ocorre a formação de poluentes secundários, como os íons sulfato e nitrato, eles se depositam no solo e na água, acarretando na degradação destes biomas (Inforzato, 2008) [19].

Muitas vezes os níveis de concentração de determinados poluentes se tornam tão altos em uma região, que ultrapassam a quantidade estabelecida para que aquele ambiente seja considerado um lugar seguro, tornando a região incapaz de oferecer uma boa qualidade de vida para os seres que ali habitam. (Marchuk, 1986) [24].

Ademais, apesar de existir uma legislação vigente no Brasil, ainda é comum que ocorram casos de queimadas, desmatamento e descarte incorreto de substâncias. No ano de 2021, uma área equivalente a  $45585\text{ km}^2$  foi queimada criminosamente na Amazônia. As dificuldades de fiscalização e o aumento do setor agropecuário são as principais causas desses incêndios (Gre-

enpeace, 2023) [16].

O fenômeno da poluição é, portanto, envolto em muitas outras questões, sejam elas sociais, econômicas, políticas, relacionadas a saúde, a conservação dos ecossistemas, a manutenção da vida local, entre outros. E, além disso, envolvem muitas variáveis, pois dependem diretamente do meio de propagação, da fonte poluidora, do tipo de poluente, das populações que ele atinge, das condições ambientais locais etc.

Logo, quando se trabalha com fenômenos como estes, que são difíceis de observar e que contém muitos detalhes, é posto o desafio de tornar o problema tratável, simplificando-o, mas, junto a isso, mantendo-o com significado. Para isso é usada a modelagem matemática.

A modelagem matemática constitui-se em uma alternativa que auxilia na descrição de eventos reais. Ela busca entender e explicar determinadas situações e, para além disso, ela interpreta matematicamente essas situações e a natureza dos fenômenos que a envolvem, ou seja, o modelo matemático é obtido ao substituir a linguagem das hipóteses pela linguagem matemática (Bassanezi, 2002; Bassanezi, 2012) [3] [4].

Diniz (2003) [12] utilizou da Equação da Difusão-Advecção para realizar simulações da dispersão de poluentes no lago Iberá, considerando a interação entre o meio aéreo e aquático. Para isso, a equação foi discretizada por meio do método de elementos finitos. Guaca, Silva e Meyer (2015) [17] também utilizam essa equação, mas discretizando-a pelo método de diferenças finitas de segunda ordem e do método de Crank-Nicolson. Além disso, eles também adotam condições de contorno de Robin.

Outros trabalhos como Inforzato (2008) [19], Oliveira (2003) [27] e Santana (2019) [33] também utilizam da Equação da Difusão-Advecção para modelar a dispersão de poluentes em sistemas aquáticos, com ou sem interação com meios aéreos. Todos estes trabalhos demonstram que o modelo é uma boa opção, haja visto a facilidade de se discretizar e implementá-lo computacionalmente.

Os trabalhos que utilizam das Equações de Euler para observar o comportamento de poluentes não são tão facilmente encontrados como os que utilizam da Equação da difusão-Advecção. Um exemplo do uso das Equações de Euler é o trabalho de Júnior, Gramani e Kaviski (2015) [20] que busca modelar a ruptura de uma barragem, porém são feitas adaptações nas equações para que se encaixem melhor na solução buscada pelos autores.

É diante do apresentado que este trabalho se propõe a simular cenários para observar como um poluente se comporta ao longo do tempo, observando sua dispersão, deslocamento e sua

concentração. Para isso foram utilizadas as Equações de Euler e a Equação da Difusão-Advecção. Dessa forma, os objetivos deste trabalho são:

- Compreender o processo da dispersão de poluentes;
- Estudar modelos utilizados para a descrição do comportamento da poluição;
- Resolver numericamente os modelos matemáticos selecionados;
- Realizar simulações computacionais de cenários;
- Interpretar os resultados obtidos por meio das simulações.

No Capítulo 1 deste trabalho será apresentada uma definição para a poluição, além de serem discutidas as poluições atmosférica e aquática. No Capítulo 2, serão apresentadas as equações utilizadas nesta pesquisa, sendo estas a Equação da Difusão-Advecção e as Equações de Euler. O Capítulo 3 irá abordar os métodos numéricos utilizados para tratar as equações, bem como a forma que foram discretizadas. As simulações e resultados obtidos a partir dos modelos estão no Capítulo 4. Por fim, serão feitas as Considerações Finais no Capítulo 5.

# Capítulo 1

## Poluição

Com o crescente desenvolvimento da indústria, da agropecuária e do aumento da emissão de poluentes surgiram diversos problemas relacionados a preservação dos ecossistemas. A poluição local em diversas cidades ultrapassa os valores aceitáveis para que se tenha uma boa qualidade de vida. Os trabalhos relacionados à extração de minerais causam erosão e contaminação a vastas extensões de terra. O aumento do dióxido de carbono, devido à queima de hidrocarbonetos, resulta na contaminação da atmosfera e na mudança do equilíbrio térmico do globo.

Junto a isso, ainda há o surgimento de outras preocupações, como a possibilidade de acidentes nucleares, a maneira que ocorre a geração e descarte de resíduos radioativos, o uso de pesticidas e petroquímicos e os vazamentos de produtos tóxicos. O motivo de tais preocupações está relacionado ao aumento de estudos, que ocorreram no final do século XX, que apresentavam evidências que estas substâncias poderiam estar ligadas ao câncer, a distúrbios no sistema imunológico e a outras doenças (Vallero, 2008) [35].

Historicamente, a consciência ambiental começou a ganhar força durante o final da década de 1960. Eventos como o smog em Londres, de 1952, onde houve mais de quatro mil mortes devido à poluição atmosférica, tiveram grande impacto para que fossem iniciadas as discussões acerca da qualidade ambiental e a sua importância. A partir daí diversas leis foram criadas a fim de manter um monitoramento sobre os níveis de poluição e a integridade dos ecossistemas.

No Brasil a Lei 601 de 1850, promulgada por Dom Pedro II, foi a primeira lei que visava o meio ambiente. Essa lei proibia a exploração florestal em terras descobertas, porém sua implementação foi falha e as pessoas a ignoraram. Já no século XX, houve a criação da Lei Federal 4.771 de 1965, que alterava o código florestal brasileiro de 1934, buscando preservar os biomas

existentes. Porém essa lei permitia o desmatamento desde que houvesse algum replantio, algo que não garantia a preservação de diferentes espécies (MMA, 2015 apud. Pott e Estrela, 2017) [29].

Após 1972, ano em que ocorreu a Conferência das Nações Unidas em Estocolmo, a Unesco junto de outras entidades, começaram a promover de maneira mais enfática a importância da conservação do planeta, lembrando que os recursos disponíveis são finitos, que a poluição e a degradação ambiental geram maléficos a todos, seja direta ou indiretamente. Além disso, torna-se pauta dessas reuniões a importância de se discutir a preservação ambiental nas escolas (Pott e Estrela, 2017) [29].

O Brasil acompanha essa tendência mundial, criando, ainda no século XX, outras leis de preservação, além de padrões e avaliações da qualidade ambiental. Nessa mesma época, e para realizar a avaliação e monitoramento, foram criadas instituições como o Sistema Nacional de Meio Ambiente (Sisnama) e o Conselho Nacional de Meio Ambiente (Conama).

A cidade de Cubatão, no estado de São Paulo, durante a década de 1980, foi considerada a cidade mais poluída do mundo, com níveis de poluição atmosféricas cerca de 10 vezes maiores que o recomendado pela Organização Mundial da Saúde. Na cidade haviam 23 indústrias, sendo 11 fábricas e mais de 300 fontes de poluição do ar, da água e do solo. Atualmente a cidade não apresenta mais níveis exorbitantes de poluição, sendo que houve uma redução de 95% na emissão dos principais poluentes gerados na região (CETESB, 2024a) [8].

Pott e Estrela (2017) [29] discutem que com o início do século XXI as discussões e atitudes voltadas para a preservação ambiental e mudanças climáticas foram enfraquecidas. O discurso do desenvolvimento sustentável ainda era visto como um impecilho para o crescimento econômico, e apesar de terem surgido novas leis, algumas sofreram alterações que regrediam nas questões socioambientais.

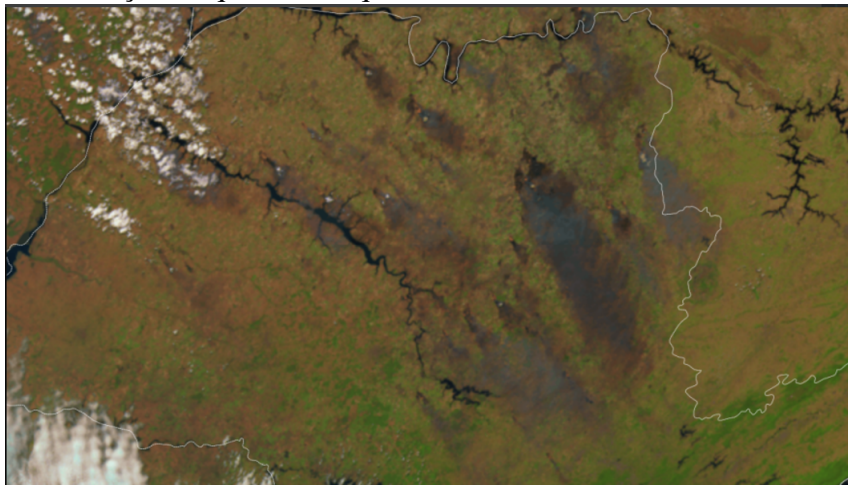
Junto a isso, destaca-se que apesar da legislação vigente, o desmatamento, as queimadas e a poluição e desvios dos recursos hídricos ainda ocorrem em grande número. No ano de 2021, uma área equivalente a  $45585\text{ km}^2$  foi queimada na Amazônia. Esses focos de incêndio são, em sua maioria, criminosos, ocasionados propositalmente para "limpar" os espaços e então os tomarem para a agropecuária (Greenpeace, 2023) [16].

No ano de 2023 foi registrado que todas as regiões do Brasil possuem níveis de poluição de material particulado fino (menores que 2,5 micrômetros) acima que o recomendado pela Organização Mundial da Saúde (OMS). Essa poluição atmosférica tem como principais fonte a

emissão de veículos, indústrias e as queimadas (Coelho, 2024) [11].

No ano de 2024, o interior do estado de São Paulo enfrentou diversas queimadas, resultando em diversas regiões onde a visibilidade ficou afetada pelo excesso de substâncias no ar, além, é claro, dos diversos problemas respiratórios e de degradação ambiental enfrentados. A área afetada pode ser vista na Figura 1.1, onde, a partir de uma imagem de satélite, é possível visualizar a fumaça cobrindo a região.

Figura 1.1: Fumaça das queimadas que ocorreram em 2024 no estado de São Paulo.



Fonte: CPTEC/INPE apud. Sponton (2024). Disponível em:

<https://sbtnews.sbt.com.br/noticia/brasil/imagem-de-satelite-mostra-encontro-de-fumaca-das-queimadas-com-frente-fria>

A Figura 1.2 é a imagem do céu de Carapicuíba, cidade da região metropolitana de São Paulo, que devido a queimadas em 2024 teve a visibilidade afetada. A névoa densa de fumaça cobriu a cidade e dificultou a visualização dos prédios, evidências claras do nível de poluição atmosférica da região. O excesso do material particulado compromete a qualidade do ar e afeta diretamente a saúde dos moradores.

Além da poluição atmosférica, outro problema enfrentado pelo país é a poluição hídrica. Cerca de 70% da água mundial é usada pela agricultura, além disso ela é responsável por 92% da pegada hídrica humana, cerca de  $7404 \text{ km}^3$  por ano. Ademais, cerca de 80% de todas as águas residuais industriais e municipais são lançadas diretamente no meio ambiente, sem qualquer tratamento prévio (UNESCO, 2021) [34].

Na Figura 1.3 está o rio Piracicaba, na região de Tanquã, que sofreu descarte incorreto de resíduos industriais da cana-de-açúcar com alta carga orgânica. Este despejo resultou na morte de 235 mil espécimes de peixes, que podem ser identificados na figura como as regiões mais claras na água (CETESB, 2024b) [9].

Figura 1.2: Céu poluído na cidade de Carapicuíba-SP.



Fonte: G1 SP e TV Globo (2024). Disponível em:

<https://g1.globo.com/sp/sao-paulo/noticia/2024/08/23/fumaca-de-queimadas-da-amazonia-e-do-interior-chega-a-regiao-metropolitana-de-sp-e-deixa-ceu-cinza.ghtml>

Figura 1.3: Peixes mortos no trecho de Tanquã.



Fonte: CETESB (2024b) [9].

Portanto, fica cada vez mais evidente que a poluição afeta negativamente a saúde humana, a produtividade agrícola, os ecossistemas. E é diante desse cenário que se reforça a necessidade da ciência de prever mudanças nos sistemas ecológicos e buscar entender os impactos da ação

do homem neles, bem como investigar meios e soluções de amenizar os danos causados.

Nesse contexto, é comum que se faça a distinção entre poluentes e contaminantes, sendo que apenas o primeiro teria efeitos nocivos aparentes. Porém ao se realizar análises mais detalhadas de uma situação inicialmente descrita como contaminação, nota-se que essa surtiu efeitos nocivos, logo se trataria de um problema de poluição (Alloway e Ayres, 1997) [1].

É comum que isto ocorra pois a maior parte da poluição ambiental possui efeitos nocivos que se manifestam de forma aparente apenas após longos períodos de exposição ou decorrido certo tempo da contaminação. Há poluentes que causam câncer apenas após 10 ou 20 anos e algumas populações de espécies que desaparecem com o passar dos anos sem deixar sinais claros dos danos sofridos nos primeiros momentos.

Para não haver conflito na definição de poluição pode-se dizer que a ela ocorre a partir de uma fonte, onde há a introdução de substâncias em um meio de transporte, podendo ser o ar, a água ou mesmo o solo, ocasionando danos ao receptor, seja ele os humanos ou a flora e fauna local (Alloway e Ayres, 1997) [1].

Essas substâncias nocivas, também ditas como poluentes, possuem duas classificações básicas, sendo poluentes primários e poluentes secundários. Alloway e Ayres (1997) [1] definem que os poluentes primários são nocivos na forma em que entram no meio ambiente e os secundários passam a ser nocivos a partir da sintetização de processos químicos que ocorrem no meio ambiente, ou seja, eles inicialmente eram uma substância não, ou menos, nociva, e após entrar em contato com o meio ambiente sofre alterações na sua estrutura química e torna-se nocivo.

Ademais, a poluição pode ainda ser caracterizada pela sua fonte (poluição agrícola, poluição automobilística etc.), pelo meio afetado (poluição do ar, poluição do solo etc.) e pela natureza do poluente (poluição por metais pesados, poluição por defensivos agrícolas etc.).

Mesmo assim, ainda deve-se enfatizar que embora se considere substâncias que já são tóxicas como poluentes, situações em que há um nível elevado de um outro material dito não tóxico, também podem ser enquadradas como poluição, pois tornam-se prejudiciais ao ecossistema. Um exemplo é o nitrogênio, que é um composto essencial para o solo, mas que no ar podem causar problema respiratórios e sofrer alterações químicas que formam o ozônio (Valero, 2008) [35].

Diante de tantos malefícios torna-se claro que é necessário reduzir a presença dos poluentes, porém eles são inevitáveis. A dependência da tecnologia, do transporte mecanizado, das indústrias e a produção de excrementos, são exemplos de poluentes presentes e indissociáveis na

vida do ser humano (Alloway e Ayres, 1997) [1]. A diferença novamente estará na quantidade de resíduos produzidos, regiões com volume e taxa de emissão baixas podem ser recuperadas a partir de processos ambientais naturais, ou seja, nesses casos o equilíbrio ecológico não é drasticamente comprometido, permitindo que os mecanismos naturais de autorregeneração do ambiente atuem de forma eficaz e a área se recupere.

Por fim, vale ressaltar que, como já discutido, os efeitos nocivos da poluição podem demorar a surgir e da mesma maneira as consequências de qualquer ação de mitigação desses efeitos que forem tomadas agora demorarão para se tornarem aparentes. Mesmo assim, é importante que se pense nessas práticas, pois elas podem colaborar com o processo de diminuição dos poluentes e, portanto, serem alicerces para a permanência da qualidade do meio ambiente.

## **1.1 Poluição do Ar**

Define-se como poluição do ar, segundo a EPA (US Environmental Protection Agency's) (2007) apud. Vallero (2008) [35], a presença de contaminantes, ou quaisquer outras substâncias poluentes, no ar que interferem na saúde e no bem-estar humano, ou produzem outros efeitos prejudiciais para o meio ambiente. Essa definição indica que o ar deve atender a padrões mínimos de qualidade para assegurar a vida e o bem-estar.

De maneira semelhante a como se define poluição, pode-se definir os poluentes atmosféricos como passivos, aqueles que não sofrem alterações até sua queda na superfície, e os ativos, que sofrem reações químicas com vapores de água e outros componentes enquanto se propagam no ar (Edelstein-Keshet, 2005) [13].

A propagação dos poluentes atmosféricos ocorre devido à transferência advectiva por massas de ar e pela difusão, originada pelas rajadas turbulentas. Para compreender melhor estes processos pode-se pensar no espalhamento da fumaça de uma chaminé, o formato que ela se espalha é em cone, alongando-se na direção dos ventos locais. Isso ocorre pois inicialmente a fumaça é levada pelo ar e em seguida ela se dispersa devido às turbulências. Quando se considera longos períodos de tempo, como meses ou anos, deve-se ainda dar atenção às flutuações na velocidade e direção do vento, pois as massas de ar mudam repetidamente ao longo desses períodos.

Vale ressaltar que, se o poluente consiste em partículas grandes, elas irão cair em direção ao solo durante sua propagação no ar com velocidade constante após certo tempo. Isso ocorre pois

haverá equilíbrio entre as forças no eixo vertical atuantes na partícula e ela alcançará velocidade terminal. Portanto, esses materiais particulados de maior dimensão terão seu movimento mais influenciado devido a gravidade do que a difusão. Por outro lado, para partículas mais leves, como os gases do tipo óxidos, a deposição no solo ocorre principalmente devido ao processo de difusão (Edelstein-Keshet, 2005) [13].

Em se tratando de poluentes no ar, nem sempre é possível identificá-los facilmente, sendo então necessário estabelecer um padrão sobre o que se pode considerar como poluição. Para isso, considera-se algumas perguntas, que dizem respeito especialmente ao contato entre o poluente e o receptor, como: qual é o estado do ecossistema e das pessoas do local, qual a composição física e química e qual a forma de exposição ao poluente etc. Essas perguntas ajudam a determinar o alcance e grau da poluição (Vallero, 2008) [35].

Junto a isso, para realizar esse nivelamento, faz-se necessário distinguir um ar com qualidade de um ar poluído. A principal diferença, assim como vem sendo discutido ao longo desse capítulo, são os danos causados pelo ar poluído, como problemas de saúde e danos a edifícios e ao ecossistema.

Dessa forma, existem alguns padrões adotados para os gases de ozônio, monóxido de carbono, dióxido de enxofre, dióxido de nitrogênio, além, do chumbo e de materiais particulados que estabelecem a concentração máxima desses compostos que uma região deve ter para que seja considerada em conformidade, ou seja, não ocasione danos à saúde e ao meio ambiente (Vallero, 2008) [35]. A definição desses parâmetros, junto a medições regulares dos compostos do ar, ajuda a perceber as necessidades de uma região para que ela esteja em conformidade, tornando possível buscar meios de mitigar a produção dos principais compostos em excesso na atmosfera local e auxiliando na conservação do meio ambiente e da saúde da população.

## **1.2 Poluição da Água**

A poluição aquática pode ser categorizada entre fonte pontual e fonte difusa. A fonte pontual ocorre quando um poluente entra em contato com a água por meio de um tubo ou canal e sua principal fonte são as instalações industriais e estações de tratamento de águas residuais. Já as fontes difusas não possuem um ponto de entrada específico, como no caso dos escoamentos de pesticidas na agricultura e de sedimentos em canteiros de obras (Peirce, Weiner, Vesilind, 1990) [28].

Os poluentes mais danosos para a água são aqueles que esgotam o oxigênio, como é o caso de resíduos do processamento do leite, da cerveja e de fábricas de papel. Outros poluentes que também são danosos ao ambiente aquático são o nitrogênio e o fósforo, pois promovem a eutrofização acelerada, tornando a água inutilizável para o consumo e imprópria para a biota aquática. Sedimentos resultantes da erosão da terra também são classificados como poluentes, pois interferem na desova e alimentação dos peixes, logo, causam danos a um receptor (Peirce, Weiner, Vesilind, 1990) [28].

Há ainda outras formas de poluição aquática, como o petróleo, que é potencialmente prejudicial. Mesmo nos casos que ele não interfere direta e imediatamente nas espécies locais, posteriormente é possível observar seus malefícios, pois ele modifica as características da água e por consequente a qualidade de vida da região. Os danos serão mais evidentes para espécies aquáticas, que mantêm contato direto com o meio, porém, outras espécies também serão afetadas, devido aos recursos se tornarem impróprios para consumo.

No entanto, é importante lembrar das interações entre as espécies, que podem amplificar esses efeitos. Mesmo que não haja uma interferência direta, a poluição de lagos, rios, mares e oceanos prejudica a qualidade de vida de outros componentes do ecossistema local, além de comprometer a qualidade de vida e a saúde humana.

## Capítulo 2

# Dinâmica dos Fluidos

A dinâmica dos fluidos busca estudar o comportamento de fluidos em movimento, que comumente ocorre quando forças agem sobre eles. Pode-se definir que fluidos não possuem uma forma preferencial, ao contrário de sólidos, e quando são homogêneos podem ser reorganizados livremente sem alterar suas propriedades macroscópicas (Batchelor, 2000) [5].

Ademais, a distinção entre líquidos e gases não é tão relevante para o estudo das suas dinâmicas, pois ambos compartilham as propriedades de fluidez, diferindo-se apenas nas características de densidade e compressibilidade. Os gases são mais compressíveis que os líquidos e sofrem maiores mudanças no volume específico sob variações altas de pressão. Apesar disso, em situações em que as variações de pressão são pequenas, líquidos e gases se comportam de maneira similar (Batchelor, 2000) [5].

Neste capítulo será discutida uma das formas possíveis de se estudar a dinâmica de fluidos: a partir da modelagem matemática. Para isso será dada a definição de modelagem matemática e apresentado dois modelos que podem descrever o comportamento de um fluido ao longo do tempo, sendo elas as equações diferenciais parciais: Equação da Difusão-Advecção e as Equações de Euler.

### 2.1 Modelagem Matemática

A modelagem matemática se ocupa de entender e explicar determinadas situações reais, interpretando-as matematicamente e estudando a natureza dos fenômenos que envolvem tal situação, ou seja, a modelagem matemática se encarrega de substituir a linguagem das hipóteses pela linguagem matemática. Dessa forma, a modelagem descreve por meio de operações mate-

máticas o objeto de estudo e ajuda a compreendê-lo melhor, auxiliando, portanto, outros campos do conhecimento (Bassanezi, 2002; Bassanezi, 2012)[3] [4]

O modelo matemático traz consigo a vantagem de poder se ter um meio conciso de expressar ideias e possibilitar o cálculo de soluções numéricas a partir da implementação computacional. Logo, torna-se possível o tratamento matemático e a obtenção de resultados para os problemas analisados.

Para Bassanezi (2002)[3] existem 6 passos fundamentais para a modelagem, experimentação, abstração, resolução, validação, modificação e aplicação. Uma vez que se já se tenha escolhido um tema para estudo, deverá ser realizado o experimento, processo no qual se realiza a busca e obtenção de dados acerca do problema. A obtenção desses dados pode variar de acordo com o tema, natureza dos experimentos e objetivos de pesquisa.

A seguir é necessário fazer a abstração, e nesta etapa é realizada a busca da formulação do modelo matemático. Para isso são delimitadas as variáveis com as quais se está trabalhando, indicado o que se pretende resolver, formulado a uma hipótese na busca de vislumbrar um panorama geral a partir dos dados observados, e feitas simplificações, com o objetivo de diminuir os detalhes do objeto de estudo, para que com isso o modelo torne-se menos complexo e possa ser tratável.

A resolução, como o nome diz, trata-se de resolver o modelo matemático proposto, por isso está diretamente vinculada à complexidade do modelo. Em alguns casos só é possível a resolução utilizando métodos numéricos e/ou computacionais, e mesmo assim os resultados obtidos são aproximações da solução.

Após isso é necessário a etapa de validação, onde é questionado se o modelo proposto está correto. Para tal, deve-se analisar o modelo e as hipóteses que lhe são atribuídas, confrontando com dados empíricos e comparando se soluções estão de acordo com os valores obtidos no sistema real.

Ao fazer a validação do modelo, caso ele não seja aprovado, deve-se pensar em possíveis modificações e quais os motivos que levaram aos erros observados. É justamente esse momento que se caracteriza como a quinta etapa: modificação. Ainda cabe dizer que os modelos não são definitivos pois é comum mudanças nas áreas de estudo que podem ocasionar alterações e melhorias ao modelo.

Uma vez que o modelo proposto seja validado temos uma solução, logo se faz o uso do mesmo mediante o problema apresentado, realizando então o último passo: a aplicação.

Neste trabalho, o tema escolhido foi a dispersão de poluentes, haja visto que a produção humana vem aumentando e conseqüentemente gerando cada vez mais resíduos que em sua maioria são descartados irregularmente. A modelagem matemática, portanto, pode ajudar neste processo, trazendo informações pertinentes sobre como o poluente irá se comportar ao longo do tempo, tornando possível se preparar e tomar medidas para minimizar os danos causados. A seguir serão apresentados dois modelos que podem ser utilizados com essa finalidade.

## 2.2 Equação Diferencial Parcial da Difusão-Advecção

As equações diferenciais parciais (EDPs) são equações que possuem mais de uma variável independente. Elas são comuns em problemas físicos, pois estes dependem não somente da variação do tempo, mas também da mudança na posição.

A concentração de algo pode ser expresso matematicamente por uma EDP (Inforzato, 2008)[19] e para o caso da concentração de um poluente pode-se utilizar a equação da difusão-advecção, como ocorre neste trabalho.

A equação da difusão-advecção expressa a concentração de um poluente em uma determinada região e um determinado instante de tempo. Este modelo é descrito genericamente como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = [\text{difusão}] - [\text{transporte}] - [\text{decaimento}] + [\text{fonte}],$$

em que  $\partial u / \partial t$  a taxa de concentração do poluente ao longo do tempo. Com relação aos outros termos tem-se que a difusão trata da propagação do poluente de um estado de maior concentração para um de menor concentração. Ela é modelada classicamente como

$$[\text{difusão}] = \nabla(\alpha \nabla u).$$

com  $\alpha$  sendo o coeficiente de difusão e  $\nabla(\alpha \nabla u = \alpha \Delta u$  (Inforzato, 2008; Diniz, 2003) [19] [12]. O transporte, que ocorre pela advecção, considera o movimento do poluente. Para meios atmosféricos é considerado o fluxo dos ventos, já para meios aquáticos considera-se além do fluxo dos ventos, o fluxo da água. Uma importante consideração acerca do transporte é que ele ocorre sem que o poluente se degrade no processo. A modelagem para o transporte por advecção é

$$[\text{transporte}] = \nabla \vec{W} u$$

em que  $\vec{W}$  é o vetor campo de velocidades. O decaimento expressa perdas de poluente ocasionadas por agentes naturais, tais como a evaporação, decantação, degradação e outras interações que podem ocorrer com o poluente e gerar seu desgaste. Sua modelagem é dada por

$$[\text{decaimento}] = \sigma u$$

sendo  $\sigma$  o coeficiente de decaimento. Por último a fonte expressa, como o nome diz, uma fonte poluidora, ou seja, um meio por onde a concentração do poluente aumenta. Ela será descrita matematicamente de acordo com o problema estudado, podendo ser constante ou uma função de uma ou mais variáveis.

Considerando todas as modelagens classicamente adotadas para a equação a difusão-advecção pode-se escrevê-la como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \Delta u - \nabla \vec{W} u - \sigma u + f \quad (2.1)$$

em que  $\alpha$  é o coeficiente de difusão,  $\vec{W}$  o campo de velocidades,  $\sigma$  o coeficiente de decaimento e  $f$  a fonte poluidora (Inforzato, 2008; Diniz, 2003) [19] [12].

Ademais, para os cenários que envolvem meios aquáticos, o termo advectivo, relacionado ao vetor campo de velocidades, será composto pela junção da influência dos ventos e da correnteza atuando sobre o domínio, sendo

$$W_n = c_v W_{v_n} + W_{p_n}, \quad (2.2)$$

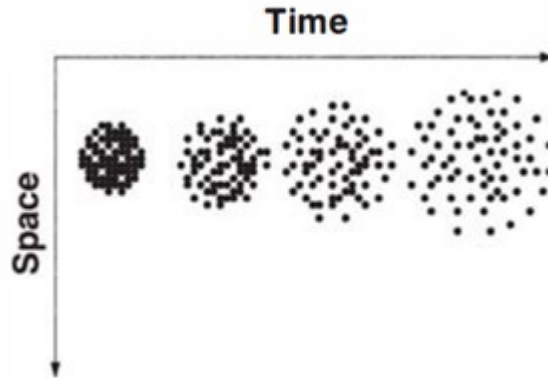
onde  $c_v$  é a constante de proporcionalidade,  $W_{p_n}$  a circulação superficial e  $W_{v_n}$  o vetor do vento. Logo, os ventos que atingem a região são parcialmente responsáveis pela influência nos valores do vetor  $\vec{W}$ , sendo multiplicados pelo coeficiente de proporcionalidade  $c$ , comumente considerado na literatura como 3% (Oliveira, 2003) [27].

### 2.2.1 O fenômeno da difusão e da advecção

O fenômeno de difusão caracteriza ao movimento de massa que uma substância realiza, indo de áreas de maior concentração para áreas de menores concentrações. Na Figura 2.1 é

possível observar esse fenômeno. A mancha de corante se espalha e dilui ao longo do tempo, quase não movendo seu centro de massa para qualquer direção espacial (Chapra, 1997; Bird, Stewart, Lightfoot, 2017) [10] [6].

Figura 2.1: Difusão de uma mancha de corante no tempo e no espaço.



Fonte: Chapra, p. 138, 1997. [10].

Considerando a escala microscópica, a difusão molecular ocorre devido ao movimento Browniano, que, por sua vez, é caracterizado pelo movimento aleatório de pequenas partículas que estão imersas em um fluido, esse movimento é ocasionado devido às colisões das partículas com as moléculas desse fluido.

Já quando se considera escalas maiores, um tipo semelhante de movimento ocorre devido a presença de redemoinhos no fluido, sendo denominada de difusão turbulenta. Em ambos os casos, a tendência ocasionada devido a difusão é minimizar gradientes, relacionados as diferenças de concentração, movendo a massa de regiões de alta para baixa concentração (Chapra, 1997) [10].

Para além disso, é possível formalizar ainda mais o processo de difusão utilizando a lei de Fick. A lei descreve o fluxo da massa é proporcional ao gradiente da concentração,

$$J_x = -\alpha \frac{du}{dx}$$

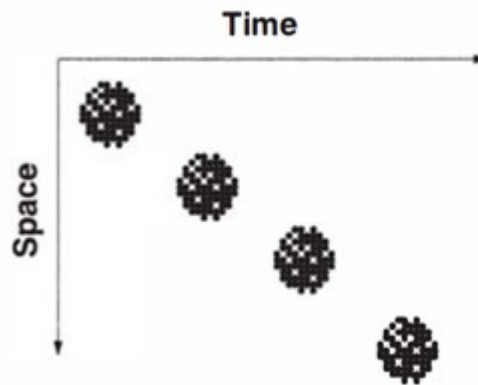
onde  $J_x$  o fluxo de massa na direção  $x$ ,  $\alpha$  o coeficiente de difusão e  $dc/dx$  o gradiente da concentração.

O sinal é negativo para assegurar que o fluxo da massa prossiga na direção correta. Por exemplo, na condução do calor, a energia irá fluir de regiões de alta temperatura para regiões de baixa temperatura. Do mesmo modo, a lei de Fick possui o sinal negativo para dizer que a massa flui de regiões de alta concentração para regiões baixa concentração, sendo proporcional

a um coeficiente de difusão  $\alpha$  (Chapra, 1997) [10].

Já a advecção é definida como o transporte de uma substância sem que haja a alteração na identidade dela. Na Figura 2.2 é possível observar uma esquematização do processo de movimento por advecção de uma mancha de corante ao longo do espaço e tempo. É possível notar na figura que a mancha se locomove, mas se mantém igual ao longo do tempo, apenas mudando sua posição (Chapra, 1997) [10].

Figura 2.2: Advecção de uma mancha de corante no tempo e no espaço.



Fonte: Chapra, p. 138, 1997 [10].

Seu deslocamento será na mesma direção e sentido do fluxo do fluido, tendo velocidade igual à velocidade média do escoamento. Um exemplo de transporte que envolve a advecção é quando se considera um fluxo de água através da saída de um lago, em um rio ou estuário (Bird, Stewart, Lightfoot, 2017) [6].

Geralmente, a descrição do movimento de uma substância ao longo do tempo é feita considerando a advecção e a difusão. Apesar disso, o uso ou não de ambos os fenômenos deve levar em conta outros fatores, como o intervalo de tempo e o tipo de escoamento que está sendo estudado.

## 2.3 Equações de Euler

As equações de Euler são um conjunto de equações diferenciais parciais que descrevem, para fluidos newtonianos, um escoamento incompressível e não viscoso. Elas são, portanto, uma simplificação das equações de Navier-Stokes, considerando que a viscosidade é nula  $\mu = 0$  (Pritchard e Mitchell, 2015) [30].

Ao todo são três as equações que constituem as equações de Euler, sendo: a equação da

continuidade, ou equação da conservação de massa, dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0, \quad (2.3)$$

equação da quantidade de movimento dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho uw) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho vu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho vw) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho w) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho wu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho wv) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2 + p) &= 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

e a equação da energia, descrita como

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}(E + p)) \quad (2.5)$$

com

$$E = \frac{1}{2}[\rho(u^2 + v^2 + w^2)] + \varepsilon$$

e

$$\varepsilon = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}$$

Além disso, para todas as equações,

$$\rho = \rho(x, y, z, t) \quad (\text{densidade do fluido})$$

$$\vec{V} = (u, v, w) \quad (\text{velocidade do fluido})$$

$$p = p(x, y, z, t) \quad (\text{distribuição de pressão no fluido})$$

$$E = E(x, y, z, t) \quad (\text{energia total do fluido})$$

$$\varepsilon = \varepsilon(x, y, z, t) \quad (\text{energia interna do fluido})$$

$$\gamma = \text{constante} \quad (\text{calor específico do fluido})$$

### 2.3.1 Equação da Continuidade

A equação da continuidade, ou equação da conservação de massa, pode ser obtida através da lei da conservação de massa, que tem sua formulação atribuída a Lavosier. Essa lei afirma que a massa total de um sistema é conservada no tempo, se caracterizando como uma lei de conservação local, pois a massa transita pelo espaço do sistema para ir de um ponto a outro (Pritchard e Mitchell, 2015) [30].

Com essa lei é possível relacionar a variação de massa de uma região com o fluxo total de massa para fora dessa região, já que para haver a mudança na massa, o corpo deve se deslocar para fora da área do sistema estudado. Matematicamente essa lei é representada como

$$\frac{dM_l}{dt} = \Phi \partial_l \quad (2.6)$$

sendo  $l$  a região fixa estudada,  $dM_l$  a massa do fluido dentro da região e  $\Phi \partial_l$  o fluxo total de massa pela superfície.

Uma outra equação utilizada para uma das possíveis construções da equação da continuidade é a equação do Teorema do Transporte de Reynolds. Essa equação expressa a relação entre a taxa de variação total de uma propriedade extensiva  $N$  qualquer, a taxa de variação em relação ao tempo da propriedade  $N$  dentro do volume de controle e a taxa resultante do fluxo da propriedade  $N$  através da superfície de controle. Sua formulação matemática é

$$\frac{dN}{dt}_{\text{sistema}} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \eta \rho dV' + \int_{SC} \eta \rho \vec{V} \cdot \vec{n} dA. \quad (2.7)$$

De modo geral, a lei fundamental da conservação de massa expressa a relação entre a taxa de variação de massa dentro do volume de controle (VC) e o fluxo de massa líquido saindo pela superfície de controle (SC), isto é,

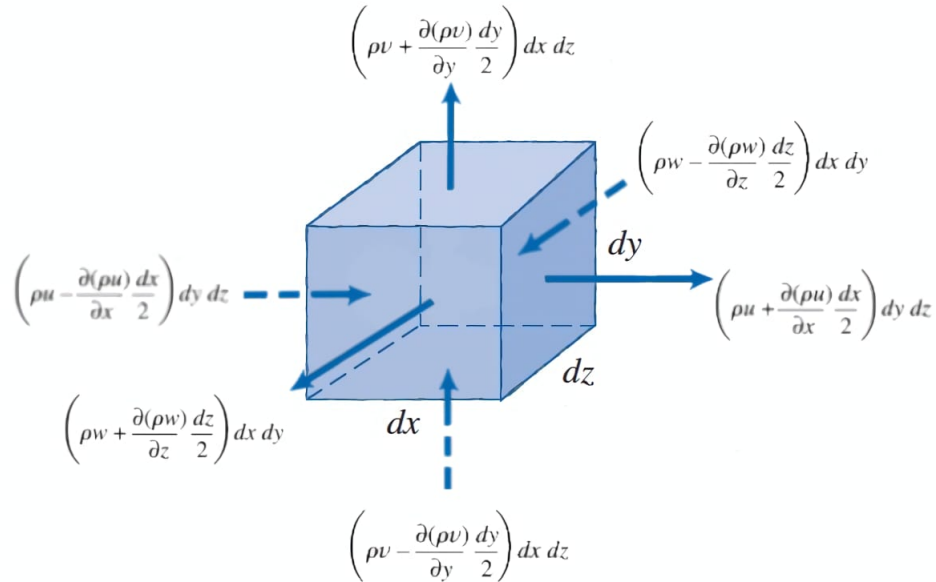
$$\begin{aligned} & \text{[Taxa de variação de massa dentro do Volume de controle]} \\ & + \\ & \text{[Taxa líquida de fluxo de massa saindo através da superfície de controle]} \\ & = 0. \end{aligned}$$

Pode-se escrever matematicamente tal lei como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho dV' + \int_{SC} \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (2.8)$$

A Figura 2.3 apresenta o volume de controle infinitesimal descrito, com as vazões de massa para cada superfície do cubo.

Figura 2.3: Vazões de massa para o volume de controle.



Fonte: Pritchard e Mitchell, 2015, p. 145 [30]. Adaptada pela autora.

Considerando a segunda parte da equação tem-se que

$$\int_{SC} \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} = \sum_{\text{saíndo}} + \sum_{\text{entrando}} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \int_{SC} \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} &= [\rho u(x + dx/2) dy dz + \rho v(y - dy/2) dx dz + \rho w(z + dz/2) dx dy] - \\ &[\rho u(x - dx/2) dy dz + \rho v(y - dy/2) dx dz + \rho w(z - dz/2) dx dy] = \\ &= \left[ \left( \rho u + \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) \frac{dx}{2} \right) dy dz + \left( \rho v + \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) \frac{dy}{2} \right) dx dz + \left( \rho w + \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \frac{dz}{2} \right) dx dy \right] - \\ &\left[ \left( \rho u - \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) \frac{dx}{2} \right) dy dz + \left( \rho v - \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) \frac{dy}{2} \right) dx dz + \left( \rho w - \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \frac{dz}{2} \right) dx dy \right] \end{aligned}$$

Realizando as somas tem-se

$$\int_{SC} \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} = \left[ \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (2.10)$$

Resolvendo a equação (2.8) obtém-se para o fluxo da superfície de controle

$$\int_{SC} \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} = \left[ \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (2.11)$$

e para a variação do volume de controle

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho dV' = \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \quad (2.12)$$

Substituindo as equações (2.11) e (2.12), na equação (2.8) tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz + \left[ \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \right] dx dy dz = 0,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) = 0.$$

A equação acima ainda pode ser reescrita usando o conceito de divergente, logo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{V} = 0.$$

Essa equação, apresentada anteriormente em (2.3), é a forma diferencial da equação da continuidade ou equação da conservação de massa (Pritchard e Mitchell, 2015) [30].

### 2.3.2 Equação da Quantidade de Movimento

Segundo (Pritchard e Mitchell, 2015) [30], a equação da quantidade de movimento é uma equação dinâmica que descreve o movimento de um fluido, podendo ser obtida a partir da segunda lei de Newton aplicada em uma partícula fluida, ou seja,

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}, \quad (2.13)$$

onde  $\vec{p}$  é a quantidade de momento linear do sistema e pode ser expresso como

$$\vec{p}_{\text{sistema}} = \int_{\text{massa}_{\text{sistema}}} \vec{V} dm.$$

Logo, pode-se reescrever a equação (2.13) como

$$\vec{F} = dm \frac{d\vec{V}}{dt}. \quad (2.14)$$

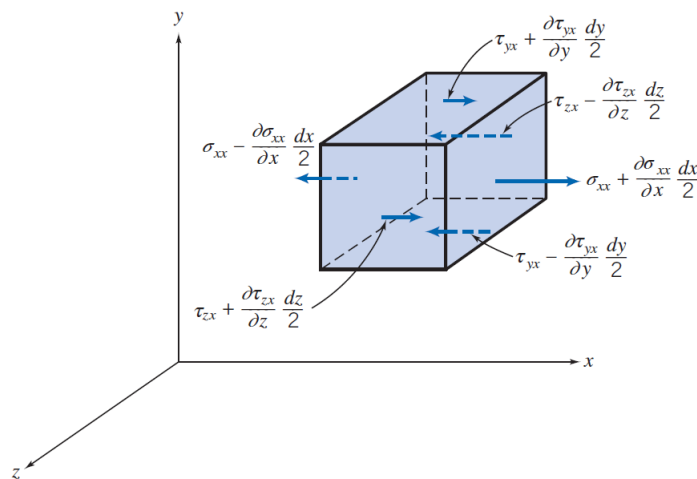
Considerando a equação para a aceleração de uma partícula fluida a equação (2.14) pode ser reformulada sendo

$$d\vec{F} = dm \frac{D\vec{V}}{Dt} = dm \left[ u \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} + v \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} + w \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} \right]. \quad (2.15)$$

A fim de continuar a discussão, vale resaltar que existem dois tipos de força que atuam sobre uma partícula fluida, as forças de campo e as forças de superfície, como as forças normais e as tangenciais ou de cisalhamento.

Considerando o componente  $x$  da força que atua sobre um elemento diferencial de massa  $dm$  e volume  $dV = dxdydz$  e que somente as tensões que atuam em  $x$  dão origem às forças de superfície nessa mesma direção, além de que as tensões no centro do elemento diferencial são tomadas como  $\sigma_{xx}$ ,  $\tau_{yx}$  e  $\tau_{zx}$ , então as tensões que atuam na direção  $x$  em cada face do elemento são obtidas por uma expansão em séries de Taylor em torno do centro do elemento, conforme apresentado na Figura 2.4 (Pritchard e Mitchell, 2015) [30].

Figura 2.4: Tensões sobre um elemento de fluido na direção  $x$ .



Fonte: Pritchard e Mitchell, 2015, p. 167 [30].

A força de superfície resultante  $dF_{S_x}$  na direção  $x$  é resultado do somatório das forças que atuam nessa direção, logo

$$dF_{S_x} = \left( \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dxdydz. \quad (2.16)$$

Se for considerada apenas a gravidade atuando, a força do corpo por unidade de massa será igual. Logo a força resultante na direção  $x$  é a força da gravidade somada à força de superfície,

dada pela equação (2.16).

$$dF_x = dF_{B_x} + dF_{S_x} = \left( \rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz. \quad (2.17)$$

De maneira análoga, para as demais componentes de direção y e z tem-se, respectivamente,

$$dF_y = dF_{B_y} + dF_{S_y} = \left( \rho g_y + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (2.18)$$

$$dF_z = dF_{B_z} + dF_{S_z} = \left( \rho g_z + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) dx dy dz. \quad (2.19)$$

As equações diferenciais da quantidade de movimento podem ser obtidas substituindo as equações (2.17), (2.18) e (2.19) na equação (2.15), então para x

$$\rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho \left[ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial t} \right], \quad (2.20)$$

para y,

$$\rho g_y + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} = \rho \left[ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial t} \right], \quad (2.21)$$

e para z,

$$\rho g_z + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = \rho \left[ u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial t} \right]. \quad (2.22)$$

Essas equações se aplicam para qualquer partícula fluida e satisfazem a hipótese do contínuo. As equações de Navier-Stokes servem para descrever o comportamento de fluidos newtonianos, esses por sua vez, possuem tensões viscosas diretamente proporcionais à taxa de deformação por cisalhamento, ou deformação angular. Para um escoamento newtoniano unidimensional e laminar, a tensão de cisalhamento é proporcional à taxa de deformação angular ( $\tau_{yx} = du/dy$ ). Já para o escoamento tridimensional as tensões podem ser expressas em termos de gradientes de velocidade e de propriedades dos fluidos (Pritchard e Mitchell, 2015) [30], sendo

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right),$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right),$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right),$$

$$\sigma_{xx} = -p - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$\sigma_{yy} = -p - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y},$$

$$\sigma_{zz} = -p - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z},$$

com  $p$  sendo a pressão termodinâmica local, que se relaciona com a massa específica e com a temperatura, essas relações são usualmente chamadas de equações de estado.  $\mu$  é o coeficiente de atrito.

Substituindo as equações acima nas equações (2.20), (2.21) e (2.22), obtêm-se as equações de Navier-Stokes, sendo elas dadas por

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right], \quad (2.23)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right], \quad (2.24)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right]. \quad (2.25)$$

As equações de Navier-Stokes são amplamente utilizadas e conhecidas, porém uma simplificação pode ser introduzida, onde, além do escoamento ser incompressível, ele também não irá possuir atrito,  $\mu = 0$ . Nesse caso as equações se resumem a equação de Euler, dadas pelas equações (2.4) (Pritchard e Mitchell, 2015) [30].

### 2.3.3 Equação da Energia

A equação da energia é obtida a partir da primeira lei da termodinâmica, sendo também consequência da lei da conservação. Uma maneira simplificada da obtenção dessa equação é considerando o fluxo que atravessa uma superfície de controle, logo

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int_V E dV &= - \oint_{\partial V} E \vec{v} \cdot \hat{n} dS \\ - \oint_{\partial V} E \vec{v} \cdot \hat{n} dS &= \int_V \nabla \cdot (E \vec{v}) dV \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_V E dV + \int_V \nabla \cdot (E \vec{v}) dV &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla \cdot (E \vec{v}) &= 0.\end{aligned}$$

Como as equações de Euler resultam nas equações de Bernoulli, a fim de mantê-las válidas, também deve-se considerar a pressão, pois a equação de Bernoulli representa a relação entre a energia mecânica, a gravitacional e a pressão. Logo a equação de Euler para a energia considera  $E + p$  para manter a equação de Bernoulli válida, sendo então dada por (2.5) (Pritchard e Mitchell, 2015; Aris, 1962; Batchelor, 2000) [30] [2] [5].

## Capítulo 3

# Métodos Numéricos

Os métodos numéricos são empregados quando não é possível obter uma solução exata para uma equação. Nesses casos, o modelo matemático escolhido é resolvido por meio de um método numérico, que é então implementado computacionalmente para obter uma solução aproximada. Ao adotar essa abordagem, é fundamental compreender que os resultados obtidos estarão sujeitos a influências das operações numéricas realizadas, da representação computacional dos dados e dos arredondamentos e truncamentos inevitáveis (Ruggiero e Lopes, 1996) [32].

Assim, o uso de métodos numéricos é uma ferramenta útil para situações em que não se consegue obter uma solução analítica de um problema. No entanto, é importante estar atento à precisão desejada nos resultados. A escolha do método mais adequado depende do tipo de equação em questão, já que cada método tem seus próprios erros associados, que podem se tornar mais evidentes dependendo das operações matemáticas envolvidas.

Neste capítulo, serão discutidos dois métodos numéricos utilizados para discretizar as equações adotadas como modelos neste trabalho: o método de Diferenças Finitas, usado para discretizar a equação de Difusão-Advecção, e o método de Volume Finito de Lax-Friedrichs, aplicado para as equações de Euler.

### 3.1 O Método de Diferenças Finitas

A fim de melhor compreender o método de Diferenças Finitas, que foi escolhido para o tratamento numérico da equação da difusão-advecção, considera-se inicialmente um problema

de contorno do tipo

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ a_1 y(a) + b_1 y'(a) = \gamma_1 \\ a_2 y(b) + b_2 y'(b) = \gamma_2 \end{cases}$$

onde  $a_1, a_2, b_1, b_2, \gamma_1$  e  $\gamma_2$  são constantes reais e conhecidas, além de  $a_1$  e  $b_1, a_2$  e  $b_2$  não serem nulos ao mesmo tempo. Apesar de se tratar de uma Equação Diferencial Ordinária, essas equação também podem ter difusão e advecção, porém sua formulação implica em um regime estacionário.

Adicionalmente, devem-se valer os seguintes itens:

- $x_0 = a$  e  $x_n = b$ , ou seja, está sendo considerado o intervalo  $[a, b]$ ;
- O intervalo  $[a, b]$  está dividido em  $n$  partes iguais;
- Essas partes possuem comprimento igual a  $h = \frac{b-a}{n}$ ;
- Denomina-se  $x_k = x_0 + kh$  com  $k = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ ;
- E a aproximação  $y_k \approx y(x_k) = y(x_0 + kh)$  é válida.

A definição a seguir também deve ser levada em conta para validade do método “Dizemos que  $g(h)$  é  $O(h^p)$ , se existe uma constante  $C > 0$  tal que  $|g(h)| \leq C|h^p|$ ” (Ruggiero, Lopes, p. 357, 1996) [32]. Todas essas considerações são feitas para que se torne possível obter uma solução para o problema de contorno proposto. O intuito é transformar o problema dado, o problema de resolver uma equação diferencial, em um problema de resolver um sistema de equações algébricas, sendo essa a ideia base do método de Diferenças Finitas. Para isso, usam-se aproximações das derivadas por meio de uma série de Taylor (Ruggiero e Lopes, 1996) [32].

### 3.1.1 Aproximações para a primeira derivada

Dentre as aproximações mais utilizadas para a primeira derivada, encontram-se três tipos: a diferença avançada, a diferença atrasada e a diferença centrada, destas, neste trabalho, utilizaremos apenas as duas primeiras. Para obter-se tais aproximações é utilizada a Série de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x_i$  (Ruggiero, Lopes, 1996) [32].

Supondo  $y(x)$  com  $k + 1$  derivadas contínuas, tem-se que

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(x_i) + \dots + \frac{(x - x_i)^k}{k!}y^{(k)}(x_i) + \frac{(x - x_i)^{k+1}}{(k+1)!}y^{(k+1)}(\zeta_i), \quad (3.1)$$

com  $\zeta$  entre  $x$  e  $x_i$ . O último termo do lado direito da equação (3.1) representa o erro obtido devido à aproximação de  $y(x)$ , ou seja, ele equivale a subtração do resultado da equação  $y(x)$  pelo resultado obtido pela aproximação usando a série de Taylor.

### Diferença avançada

Supondo  $k = 1$  para a série apresentada na equação (3.1), obtém-se

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(\zeta_i). \quad (3.2)$$

Para o ponto  $x = x_{i+1} = x_i + h$ , a equação (3.2) se torna

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_i + h - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_i + h - x_i)^2}{2!}y''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) - \frac{h^2}{2}y''(\zeta_i) = hy'(x_i)$$

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \frac{h}{2}y''(\zeta_i) = y'(x_i). \quad (3.3)$$

Como o espaçamento  $h$  é muito pequeno, o erro pode ser desconsiderado, então se usadas as estimativas dos valores exatos para  $y(x_{i+1})$  e  $y(x_i)$ , a equação (3.3) é reescrita como

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}. \quad (3.4)$$

Por fim é possível obter o erro associado a essa aproximação. Se  $y''$  é limitada no intervalo  $[a, b]$ , existirá um  $M > 0$  tal que  $|y''(x)| \leq M$  para todo  $x$  em  $[a, b]$ , então pela definição apresentada em (3.1),

$$|g(h)| = \left| y'(x_i) - \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \right| = \left| \frac{y''(\zeta_i)}{2} h \right| \leq \frac{M}{2} |h|.$$

Logo, o erro ocasionado devido à aproximação neste caso é  $O(h)$  (Ruggiero e Lopes, 1996) [32].

### Diferença atrasada

Para a obtenção da aproximação pela diferença atrasada, novamente supõe-se  $k = 1$  para a série de Taylor apresentada na equação (3.1), sendo assim

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(\zeta_i). \quad (3.5)$$

No ponto  $x = x_{i-1} = x_i - h$ , a equação (3.5) é reescrita tal que

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) + (x_i - h - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_i - h - x_i)^2}{2!}y''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i-1}) - y(x_i) - \frac{h^2}{2}y''(\zeta_i) = -hy'(x_i)$$

$$\frac{-y(x_{i-1}) + y(x_i)}{h} + \frac{h}{2}y''(\zeta_i) = y'(x_i). \quad (3.6)$$

Como  $h$  é muito pequeno, o erro pode ser desprezado, logo usando as estimativas dos valores exatos  $y(x_{i-1})$  e  $y(x_i)$ , a equação (3.6) se torna

$$y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h}. \quad (3.7)$$

O erro pode ser obtido se  $y''$  for limitada em  $[a, b]$ . Uma vez que isso ocorra existirá um  $M > 0$  tal que  $|y''(x)| \leq M$  para todo  $x$  no intervalo  $[a, b]$ , então pela definição

$$|g(h)| = \left| y'(x_i) - \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \right| = \left| \frac{y''(\zeta_i)}{2} h \right| \leq \frac{M}{2} |h|.$$

Logo o erro neste caso é, assim como para a diferença avançada,  $O(h)$  (Ruggiero e Lopes,

1996) [32].

### Diferença centrada

Supondo  $k = 2$  para a série de Taylor (3.1), obtém-se

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}y'''(\zeta_i). \quad (3.8)$$

No ponto  $x = x_{i+1} = x_i + h$  a equação (3.8) se torna

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}y'''(\zeta_i) \\ y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i). \end{aligned} \quad (3.9)$$

E no ponto  $x = x_{i-1} = x_i - h$  a equação (3.8) se torna

$$\begin{aligned} y(x_{i-1}) &= y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}y'''(\zeta_i) \\ y(x_{i-1}) &= y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) - \frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Subtraindo a equação (3.9) da equação (3.10),

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) &= y(x_i) - y(x_i) + hy'(x_i) - (-hy'(x_i)) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^2}{2!}y''(x_i) \\ &\quad + \frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i) - (-\frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i)) \end{aligned}$$

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = 2hy'(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = 2hy'(x_i) + 2\frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i)$$

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) - 2\frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i) = 2hy'(x_i)$$

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) - 2\frac{h^3}{3!}y'''(\zeta_i)}{2h} = y'(x_i)$$

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{3!}y'''(\zeta_i) = y'(x_i). \quad (3.11)$$

Como o espaçamento  $h$  é muito pequeno o erro pode ser desconsiderado. Logo, usando das estimativas dos valores exatos para  $y(x_{i+1})$  e  $y(x_i)$ , conclui-se que

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}. \quad (3.12)$$

Por último, é possível obter o erro associado a essa aproximação. Sendo  $y'''$  limitada em  $[a, b]$ , existirá um  $M > 0$  tal que  $|y'''(x)| \leq M$  para todo  $x$  em  $[a, b]$ , então

$$|g(h)| = \left| y'(x_i) - \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right| = \left| \frac{y'''(\zeta_i)}{3!}h^2 \right| \leq \frac{M}{3!}|h^2|.$$

Então o erro cometido neste caso é  $O(h^2)$  (Ruggiero e Lopes, 1996) [32].

### 3.1.2 Aproximação para a segunda derivada

Para encontrar a diferença avançada supõe-se  $k = 3$  para a equação (3.1), sendo assim

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}y''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{(x - x_i)^4}{4!}y^{(iv)}(\zeta_i).$$

No ponto  $x = x_{i+1} = x_i + h$ , tem-se

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}y^{(iv)}(\zeta_i). \quad (3.13)$$

E no ponto  $x = x_{i-1} = x_i - h$ ,

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) - \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}y^{(iv)}(\zeta_i). \quad (3.14)$$

Somando as equações (3.13) e (3.14),

$$y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = y(x_i) + y(x_i) + hy'(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i) \\
y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) &= 2y(x_i) + 2\frac{h^2}{2!} y''(x_i) + 2\frac{h^4}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i) \\
y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) - 2y(x_i) - 2\frac{h^4}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i) &= 2\frac{h^2}{2!} y''(x_i) \\
\frac{(y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) - 2y(x_i) - 2\frac{h^4}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i))}{h^2} &= y''(x_i) \\
y''(x_i) &= \frac{y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) - 2y(x_i)}{h^2} - 2\frac{h^2}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i). \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Como  $h$  é muito pequeno o erro pode ser desconsiderado, logo usando das estimativas dos valores exatos  $y(x_{i+1})$  e  $y(x_i)$  a equação (3.15) se torna

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \tag{3.16}$$

Para a obtenção do erro, considera-se  $y^{(iv)}$  limitada no intervalo  $[a, b]$ , portanto existirá um  $M > 0$  tal que  $|y^{(iv)}(x)| \leq M$  para todo  $x$  em  $[a, b]$ , então pela definição apresentada em 3.1,

$$|g(h)| = \left| y''(x_i) - \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right| = \left| 2\frac{h^2}{4!} y^{(iv)}(\zeta_i) \right| \leq 2\frac{M}{4!} |h^2|.$$

Conclui-se então que erro cometido neste caso é  $O(h^2)$  (Ruggiero, Lopes, 1996) [32]. Por fim, vale ressaltar que para todas as aproximações apresentadas até agora, a função  $|g(h)|$  tende a zero quando  $h$  também tende a zero. Logo, no limite, a aproximação feita pelo método de diferenças finitas, resulta na solução exata da equação. Isso indica a consistência do método escolhido.

Uma vez que um método seja consistente, pelo Teorema de equivalência de Lax, se também for um método estável, ou seja, um método para o qual os erros locais não cresçam de maneira excessiva, pode-se dizer que o método escolhido é convergente (Leveque, 2002) [22].

### 3.1.3 A Equação do Calor como exemplo

A equação do Calor, ou da difusão, é do tipo

$$\alpha^2 u_{xx} = u_t, \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \tag{3.17}$$

onde  $\alpha^2$  é a difusidade térmica (Boyce e Diprima, 2015) [7].

Nesse caso, há apenas uma dimensão, ou seja, a transferência de energia pelo método calor ocorre numa barra de seção reta uniforme e de material homogêneo. Além disso, a barra deve estar perfeitamente isolada e ter dimensões da seção de reta pequenas o suficiente para que a temperatura possa ser considerada constante em qualquer seção reta (Boyce e Diprima, 2015) [7].

Se a distribuição inicial de temperatura na barra é conhecida, tem-se

$$u(x,0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (3.18)$$

onde  $f$  é uma função dada. Supondo que as extremidades da barra são matidas em temperaturas fixas, com  $T_1$  em  $x = 0$  e  $T_2$  em  $x = L$ . Se  $T_1 = T_2 = 0$ , ou seja,  $u = 0$  quando  $x = 0$  ou  $x = L$ , obtém-se

$$u(0,t) = 0 \quad u(L,t) = 0, \quad t > 0.$$

O problema descrito pelas equações acima é um problema de valor inicial. Entretanto, quando observado em relação a  $x$ , o mesmo passa a ser um problema de valores de contorno.

Para resolver este problema pode-se procurar soluções da equação diferencial do calor e das condições de contorno, para então fazer uma superposição que satisfaça a condição inicial. Uma solução possível é quando  $u(x,t) = 0$ , mas esta somente satisfaz a condição inicial no caso trivial, em que  $f(x) = 0$  (Boyce e Diprima, 2015) [7].

Logo deve-se buscar outras soluções não nulas, que satisfaçam as condições iniciais e de contorno dadas. Para isso supõe-se que  $u(x,t)$  é produto de duas outras funções, onde uma depende apenas de  $x$  e a outra depende apenas de  $t$ , ou seja,

$$u(x,t) = X(x)T(t). \quad (3.19)$$

Rescrevendo a equação (3.19),

$$u(x,t) = XT, \quad (3.20)$$

onde  $X$  depende apenas de  $x$  e  $T$  depende apenas de  $t$ . Substituindo (3.20) dado na equação do calor (3.17),

$$\alpha^2 X'' T = X T'$$

$$\frac{X''}{X} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{T'}{T}.$$

Note que para a equação acima ser válida para  $0 < x < L$  e  $t > 0$ , é preciso que ambos os lados sejam iguais à mesma constante  $-\lambda$ , ou seja,

$$\frac{X''}{X} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{T'}{T} = -\lambda.$$

Dessa forma, as duas equações diferenciais ordinárias para  $X(x)$  e  $T(t)$  são

$$X'' + \lambda X = 0 \tag{3.21}$$

$$T' + \alpha^2 \lambda T = 0. \tag{3.22}$$

Substituindo novamente a equação (3.20), mas agora nas condições de contorno em  $x = 0$ , tem-se

$$u(0, t) = X(0)T(t) = 0. \tag{3.23}$$

A equação (3.23) pode ser satisfeita escolhendo  $T(t) = 0$  para todo  $t$ , porém nesse caso  $u(x, t) = 0$  para todo  $x$  e  $t$ , e essa solução é trivial. Dessa forma, resta a opção de  $X(0) = 0$ . De maneira análoga, a condição de contorno em  $x = L$ , implica que  $x(L) = 0$  (Boyce e DiPrima, 2015) [7].

Dadas as condições de contorno, a equação  $X(x)$  será um problema de autovalores, com soluções não triviais dadas por

$$X_n(x) = \text{sen}(n\pi x/L), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

e associadas aos autovalores

$$\lambda_n = n^2 \pi^2 / L^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \tag{3.24}$$

Substituindo (3.24) na equação (3.22) tem-se

$$T' + (n^2\pi^2\alpha^2/L^2)T = 0.$$

Separando as funções da variável  $t$ ,

$$\frac{T'}{T} = \frac{-n^2\pi^2\alpha^2}{L^2}.$$

Integrando em relação a  $t$

$$\int \frac{T'}{T} dt = \int \frac{-n^2\pi^2\alpha^2}{L^2} dt$$

$$\ln|T| = \frac{-n^2\pi^2\alpha^2}{L^2} \int dt$$

$$\ln|T| = \frac{-n^2\pi^2\alpha^2}{L^2} t$$

$$e^{\ln|T|} = e^{\frac{-n^2\pi^2\alpha^2 t}{L^2}}$$

$$T = e^{\frac{-n^2\pi^2\alpha^2 t}{L^2}}.$$

Logo,  $T(t)$  é proporcional a  $e^{-n^2\pi^2\alpha^2 t/L^2}$ . Portanto, multiplicando as soluções para  $X(x)$  e  $T(t)$ , e desprezando as constantes arbitrárias de proporcionalidade, conclui-se que

$$u_n(x,t) = e^{-n^2\pi^2\alpha^2 t/L^2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Agora resta satisfazer a condição inicial (3.18). Para isso é necessário formar uma combinação linear das funções  $u_n$  e posteriormente escolher os coeficientes que satisfazem a condição inicial. Posto isso supõe-se que

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2\pi^2\alpha^2 t/L^2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (3.25)$$

onde os coeficientes  $c_n$  não estão determinados (Boyce e Diprima, 2015) [7].

Os termos individuais dessa série satisfazem a Equação do Calor. Supondo que ela converge e satisfaz as condições de contorno, será necessário, para ela satisfazer as condições iniciais, onde  $t = 0$ , que

$$u(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = f(x).$$

Com isso é possível dizer que é necessário escolher os coeficientes  $c_n$  de modo que a série de Fourier dada pela equação (3.25), convirja para a distribuição inicial de temperatura. Dessa forma, tem-se

$$c_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right) dx. \quad (3.26)$$

### Comparação entre as soluções numérica e analítica

Para poder observar as diferenças entre as soluções obtidas de maneira analítica e numérica, será considerado um problema que envolve a Equação do Calor. Neste caso, a equação possui as seguintes características

$$\begin{cases} u_t = \alpha^2 u_{xx}, & x \in (0, 1), t > 0 \\ u(x, 0) = f(x), & x \in [0, 1] \\ u(0, t) = 0, & u(1, t) = 0 \quad t > 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

onde  $f(x) = 100 \operatorname{sen}(\pi x)$ .

Para a obtenção da solução analítica utiliza-se o método de separação das variáveis discutido acima. Logo, a solução será dada pela equação (3.25) com o coeficiente  $c_n$  obtido por meio de (3.26).

Para a equação (3.27), tem-se que  $L = 1$  e  $f(x) = 100 \operatorname{sen}(\pi x)$ , logo

$$c_n = \frac{2}{1} \int_0^1 100 \operatorname{sen}(\pi x) \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi x}{1} \right) dx = 200 \int_0^1 \operatorname{sen}(\pi x) \operatorname{sen}(n\pi x) dx.$$

Para o caso em que  $m \neq n$

$$c_n = 0.$$

Para o caso em que  $m = n = 1$

$$c_n = 200 \int_0^1 \operatorname{sen}^2(\pi x) dx$$

$$c_n = 200 \left[ \frac{1}{\pi} \left( \frac{u}{2} - \frac{1}{2} \frac{\operatorname{sen}(2u)}{2} \right) \right] \Big|_0^1$$

$$\begin{aligned}
c_n &= 200 \left[ \frac{1}{\pi} \left( \frac{\pi x}{2} - \frac{\text{sen}(2\pi x)}{4} \right) \right] \Big|_0^1 \\
c_n &= 200 \left( \frac{x}{2} - \frac{\text{sen}(2\pi x)}{4\pi} \right) \Big|_0^1 \\
c_n &= 200 \left( \frac{1}{2} - \frac{\text{sen}(2\pi)}{4\pi} \right) - 200 \left( 0 - \frac{\text{sen}(0)}{4\pi} \right) = 100.
\end{aligned}$$

Portanto, a solução analítica para este caso, considerando  $\alpha^2 = 1$ , será dada pela equação

$$u(x, t) = \sum_{n=1} 100e^{-n^2\pi^2 t/1^2} \text{sen}(n\pi x) = 100e^{-\pi^2 t} \text{sen}(\pi x). \quad (3.28)$$

A solução numérica será obtida utilizando do método das diferenças finitas. Será considerado o esquema de diferenças avançado, (3.4) para a discretização temporal e o esquema de diferenças centrado (3.12) para a discretização espacial.

Para além destes,  $\Delta x$  representa o comprimento dos subintervalos espacial,  $\Delta t$  para representar o comprimento dos subintervalos temporal, e  $u(x_i, t_n) \approx U_i^n$ .

Logo, a discretização temporal será

$$U_t = \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t},$$

e a discretização espacial

$$U_{xx} = \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

Substituindo ambas na equação (3.17), teremos

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \alpha^2 \left( \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right)$$

$$U_i^{n+1} - U_i^n = \frac{\alpha^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n)$$

$$U_i^{n+1} - U_i^n = \beta (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n)$$

$$U_i^{n+1} = \beta (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n) + U_i^n$$

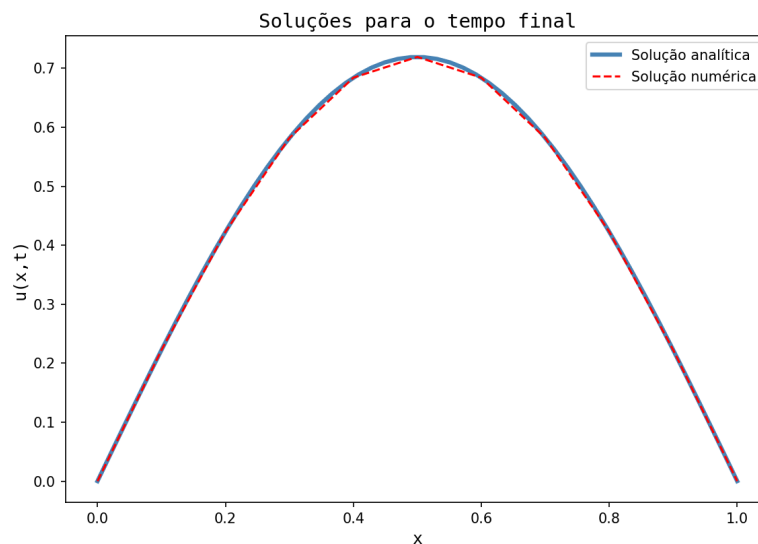
$$U_i^{n+1} = \beta U_{i+1}^n + (1 - 2\beta)U_i^n + \beta U_{i-1}^n, \quad (3.29)$$

onde  $\beta = \frac{\alpha^2 \Delta t}{(\Delta x)^2}$ .

Utilizando da linguagem Python foram plotados os gráficos das soluções obtidas para os casos analítico, equação (3.28), e numérico, (3.29). Para o caso da solução numérica considerou-se  $\alpha^2 = 1$ , tempo final  $t_f = 0.5$  e 10 subintervalos para a discretização espacial e 300 para a temporal.

Na Figura 3.1 é possível observar ambas as soluções, analítica e numérica, para o tempo final  $t = 0.5$ . Observe que a solução numérica possui resultados muito próximos aos valores exatos, demonstrando a eficácia do método.

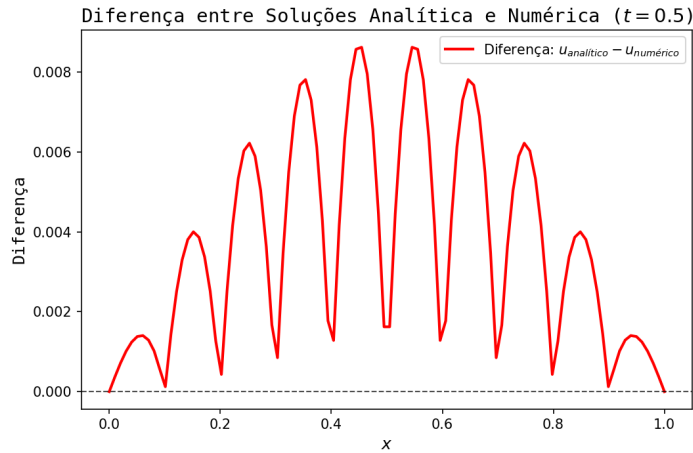
Figura 3.1: Gráfico da solução analítica e numérica para o tempo final.



Fonte: Elaborado pela autora.

A fim de melhor visualizar o erro da solução numérica em relação à analítica, foi plotado também o gráfico da diferença entre os resultados obtidos entre as soluções para o tempo final  $t = 0.5$ , Figura 3.2. Note que o erro é maior para o centro da gaussiana, onde a curva da solução é mais acentuada, isso ocorre devido a natureza da aproximação.

Figura 3.2: Gráfico da diferença entre a solução analítica e numérica para  $t = 0.5$ .



Fonte: Elaborado pela autora.

## 3.2 O Método de Lax-Friedrichs

Para a discretização das equações de Euler utilizou-se o método de Volume Finito de Lax Friedrichs, pois, o esquema UpWind, que havia sido utilizado anteriormente, mostrou-se inadequado para resolver o novo conjunto de equações. O método de Lax-Friedrichs constitui-se em uma forma de se resolver equações diferenciais parciais hiperbólicas. Seja a equação unidimensional,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

ou ainda,

$$u_t + au_x = 0, \quad (3.30)$$

com  $a$  sendo constante (Leveque, 2002) [22]. Pelo método de Lax Friedrichs

$$U_i^{n+1} = \frac{1}{2}(U_{i-1}^n + U_{i+1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}[f(U_{i+1}^n) - f(U_{i-1}^n)]. \quad (3.31)$$

Definindo o fluxo numérico como

$$\mathcal{F}(U_{i-1}^n, U_i^n) = \frac{1}{2}[f(U_{i-1}^n) + f(U_i^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(U_i^n - U_{i-1}^n) \quad (3.32)$$

e

$$\mathcal{F}(U_i^n, U_{i+1}^n) = \frac{1}{2}[f(U_i^n) + f(U_{i+1}^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(U_{i+1}^n - U_i^n), \quad (3.33)$$

o segundo termo a direita das equações (3.32) e (3.33) pode ser interpretado como a difusão numérica que amortece instabilidades, sendo estável para condições onde o número de Courant é no máximo 1. Esse método fornece uma solução demasiada amortecida a menos que se trabalhe com malhas muito finas, o que pode gerar um aumento no custo computacional (Leveque, 2002) [22].

Para esta pesquisa, ainda foi considerada a equação

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathcal{F}(U_i^n, U_{i+1}^n) - \mathcal{F}(U_{i-1}^n, U_i^n)] \quad (3.34)$$

que pode ser vista como uma aproximação direta de diferenças finitas para a lei de conservação (Leveque, 2002) [22]. Substituindo as equações de fluxo (3.32) e (3.33) na equação (3.34), obtém-se

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \frac{1}{2} [f(U_i^n) + f(U_{i+1}^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (U_{i+1}^n - U_i^n) - \frac{1}{2} [f(U_{i-1}^n) + f(U_i^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (U_i^n - U_{i-1}^n) \right] \quad (3.35)$$

que será a aproximação utilizada para a discretização das equações de Euler. Note que este método é um método explícito, pois para se obter a solução de um tempo é necessário a solução do tempo que o antecede. Logo, este método é condicionalmente estável e depende dos valores adotados para os subintervalos para se manter estável ao longo do tempo e proporcionar aproximações satisfatórias.

### 3.3 Discretização das equações

As equações que descrevem o escoamento de fluidos, assim como apresentadas no Capítulo 2, geralmente são bastante complexas, mesmo limitando o problema a casos mais simples, como quando um fluido é incompressível. Como não é possível obter solução analítica geral para essas equações, utiliza-se da discretização para se obter os resultados nestes casos.

A discretização de uma equação usa como estratégia a substituição do domínio contínuo do problema para um domínio discreto. Para isso se considera uma "malha" de pontos espaçados, denominada também de *stencil* (Pritchard e Mitchell, 2015) [30]. A diferença entre as duas abordagens é que no domínio discreto a função passa a ser definida apenas nos  $N$  pontos da ma-

lha, facilitando o cálculo da sua solução, que será feito a partir da implementação computacional da mesma.

Neste trabalho essa implementação foi feita a partir da linguagem computacional Python. Sua escolha se deu por se tratar de uma linguagem que oferece um código muito compacto e legível. E, apesar dela ser menos eficiente em termos de computacionais, como de custo, ela se destaca em termos de eficiência geral na resolução de problemas humanos (Linge e Langtangen, 2016) [23].

### 3.3.1 O Esquema UpWind

O esquema Upwind busca utilizar de diferentes aproximações, a depender de como está definido o vetor campo de velocidades, para se obter uma solução mais estável para a equação estudada. Será usada a aproximação de primeira ordem para o termo advectivo, sendo que a aproximação poderá ser diferença avançada ou atrasada a depender dos coeficientes atribuídos para as componentes do vetor  $\vec{W}$ .

Considerando que  $\vec{W} = (W_1, W_2)$ , se  $W_1 > 0$  ou  $W_2 > 0$  a solução irá se mover para o sentido positivo do eixo respectivo de cada um dos coeficientes. Da mesma forma se  $W_1 < 0$  ou  $W_2 < 0$  a solução irá se mover para o sentido negativo do eixo respectivo de cada um dos coeficientes. Sendo assim, se  $W_n > 0$ , com  $n = 1, 2$ , a aproximação mais adequada será dada pelo esquema atrasado e caso contrário,  $W_n < 0$ , a aproximação mais adequada será o esquema avançado (Leveque, 2007) [21].

### 3.3.2 Discretização da Equação da Difusão-Advecção

A discretização da equação (2.1) deve ocorrer tanto para a variável temporal, quanto para a variável espacial. O método de diferenças finitas será implementado com aproximação para a primeira derivada do tipo diferença avançada, dada pela equação (3.4), para a discretização temporal. Para o termo advectivo será empregado o esquema Upwind, que, como descrito anteriormente, usa-se diferença avançada, equação (3.4), ou atrasada, equação (3.7) a depender da direção do vetor  $\vec{W}$ . Para a discretização espacial do termo difusivo se usará a discretização centrada de segunda ordem, equação (3.16).

Considerando duas dimensões espaciais  $x$  e  $y$ , e algumas hipóteses para a simplificação do modelo matemático, tem-se que o domínio será retangular, com condições de contorno nulas, o coeficiente de difusibilidade  $\alpha$  será constante em todas as direções, o coeficiente de decaimento

$\sigma$  será proporcional à própria poluição. Além disso, o vetor  $\vec{W} = (W_1, W_2)$  e não há a presença de uma fonte poluidora.

Assim, o problema de valor inicial e de contorno que será tratado neste trabalho é

$$\begin{cases} u_t - \alpha(u_{xx} + u_{yy}) + (W_1, W_2)(u_x, u_y) + \sigma u = 0, & x \in (0, L), y \in (0, M), t > 0 \\ u(x, y, 0) = f(x, y), & x \in [0, L], y \in [0, M] \\ u(0, y, t) = 0, \quad u(L, y, t) = 0 & t > 0 \\ u(x, 0, t) = 0, \quad u(x, M, t) = 0 & t > 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

Considerando  $\Delta x$  foi para designar o comprimento dos subintervalos espaciais em  $x$ ,  $\Delta y$  para designar o comprimento dos subintervalos espaciais em  $y$ ,  $\Delta t$  para designar o comprimento dos subintervalos temporais e  $u(x_i, y_j, t_n) \approx U_{i,j}^n$ , discretiza-se a equação (3.36), a partir das equações (3.4), (3.7) e (3.16), com  $\frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} = \gamma_1$ ,  $\frac{\alpha \Delta t}{(\Delta y)^2} = \gamma_2$ ,  $\frac{\Delta t W_1}{\Delta x} = \delta_1$ ,  $\frac{\Delta t W_2}{\Delta y} = \delta_2$  e  $\sigma \Delta t = \beta$ .

Como se trata de um modelo em duas dimensões, deve-se escrever as equações discretizadas levando em conta o vetor campo de velocidades. Portanto, para o caso em que  $W_1 > 0$  e  $W_2 > 0$ , tem-se

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n(-2\gamma_1 - 2\gamma_2 - \delta_1 - \delta_2 - \beta + 1) + U_{i+1,j}^n \gamma_1 + U_{i,j+1}^n \gamma_2 + U_{i-1,j}^n (\gamma_1 + \delta_1) + U_{i,j-1}^n (\gamma_2 + \delta_2). \quad (3.37)$$

Para o caso em que  $W_1 > 0$  e  $W_2 < 0$ , segue que

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n(-2\gamma_1 - 2\gamma_2 - \delta_1 + \delta_2 - \beta + 1) + U_{i+1,j}^n \gamma_1 + U_{i,j-1}^n \gamma_2 + U_{i-1,j}^n (\gamma_1 + \delta_1) + U_{i,j+1}^n (\gamma_2 - \delta_2). \quad (3.38)$$

Se  $W_1 < 0$  e  $W_2 > 0$ , a equação discretizada será

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n(-2\gamma_1 - 2\gamma_2 + \delta_1 - \delta_2 - \beta + 1) + U_{i-1,j}^n \gamma_1 + U_{i,j+1}^n \gamma_2 + U_{i+1,j}^n (\gamma_1 - \delta_1) + U_{i,j-1}^n (\gamma_2 + \delta_2). \quad (3.39)$$

E por último, se  $W_1 < 0$  e  $W_2 < 0$ , tem-se

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n(-2\gamma_1 - 2\gamma_2 + \delta_1 + \delta_2 - \beta + 1) + U_{i-1,j}^n \gamma_1 + U_{i,j-1}^n \gamma_2 + U_{i+1,j}^n (\gamma_1 - \delta_1) + U_{i,j+1}^n (\gamma_2 - \delta_2). \quad (3.40)$$

### Condições de estabilidade

Como no método numérico adotado é possível determinar a solução de um tempo anterior usando a solução do instante de tempo atual, tem-se que este é explícito de passo simples. Por conta disso, este método é condicionalmente estável e depende dos valores adotados para os passos, ou seja,  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta t$ , para se manter estável ao longo do tempo e proporcionar aproximações adequadas.

Algumas condições devem ser estabelecidas para que as soluções obtidas permaneçam estáveis. No caso deste trabalho, as condições que devem ser respeitadas se denominam condições CFL. Essas condições recebem esse nome por causa dos matemáticos Courant, Friedrichs e Lewy que escreveram o primeiro artigo em 1928 acerca da estabilidade e convergência de métodos de diferenças finitas aplicados a equações diferenciais parciais (Morton e Mayers, 2005) [26].

Conforme discutido por Moraes (2019)[25], Leveque (2002)[22] e Morton e Mayers (2005) [26], para a equação da difusão-advecção duas condições devem ser respeitadas. A primeira diz respeito ao termo advectivo, onde

$$\left| W_n \frac{\Delta t}{\Delta n} \right| \leq 1$$

com  $n$  sendo a direção espacial observada, ou, considerando a equação usada neste trabalho e que  $\frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} = \gamma_1$ ,  $\frac{\alpha \Delta t}{(\Delta y)^2} = \gamma_2$ ,  $\frac{\Delta t W_1}{\Delta x} = \delta_1$  e  $\frac{\Delta t W_2}{\Delta y} = \delta_2$ ,

$$|\delta_1| + |\delta_2| \leq 1. \quad (3.41)$$

A outra restrição é em relação ao termo difusivo, sendo

$$\alpha \frac{\Delta t}{(\Delta n)^2} < \frac{1}{2}$$

com  $n$  representando a direção observada, ou de maneira análoga, a equação (3.41),

$$\gamma_1 + \gamma_2 \leq 1. \quad (3.42)$$

### 3.3.3 Discretização das Equações de Euler

Para tratar numericamente as equações de Euler, descritas por (2.3), (2.4) e (2.5), foi considerado um modelo unidimensional, dado por

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 & \text{(Equação da continuidade)} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = 0 & \text{(Equação da quantidade de movimento)} \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u(E + p)) = 0 & \text{(Equação da energia)} \end{cases} \quad (3.43)$$

com  $x \in [a, b]$  e  $t > 0$ . Ademais,  $\rho = \rho(x, t)$ ,  $\vec{V} = (u)$ ,  $p = p(x, t)$ ,  $E = E(x, t)$ ,  $\varepsilon = \varepsilon(x, t)$ ,  $\gamma = \text{constante}$  e

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}(\rho u^2) + \varepsilon \\ \varepsilon &= \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}. \end{aligned}$$

Novamente, foi usada a notação  $\Delta x$  para designar o comprimento dos subintervalos na direção  $x$  e  $\Delta t$  para designar o comprimento dos subintervalos temporais e  $f(x_i, t_n) = f_i^n$ .

As equações (3.43), foram discretizadas a partir do método de Lax Friedrichs modificado, assim como descrito na Subseção 5.1. Dessa forma, utilizando a aproximação dada por (3.35), a equação da continuidade discretizada é

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \frac{1}{2}[(\rho u)_i^n + (\rho u)_{i+1}^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(\rho_{i+1}^n - \rho_i^n) - \frac{1}{2}[(\rho u)_{i-1}^n + (\rho u)_i^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(\rho_i^n - \rho_{i-1}^n) \right]. \quad (3.44)$$

já a equação da quantidade de movimento discretizada fica

$$\begin{aligned} (\rho u)_i^{n+1} &= (\rho u)_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \frac{1}{2}[(\rho u^2 + p)_i^n + (\rho u^2 + p)_{i+1}^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}((\rho u)_{i+1}^n - (\rho u)_i^n) - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2}[(\rho u^2 + p)_{i-1}^n + (\rho u^2 + p)_i^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}((\rho u)_i^n - (\rho u)_{i-1}^n) \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

e a equação da energia por

$$\begin{aligned} E_i^{n+1} &= E_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \frac{1}{2}[(u(E + p))_i^n + (u(E + p))_{i+1}^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(E_{i+1}^n - E_i^n) - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2}[(u(E + p))_{i-1}^n + (u(E + p))_i^n] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(E_i^n - E_{i-1}^n) \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

As condições de contorno foram Neumann nula, ou seja,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho}{\partial n} \right|_a &= 0 & \left. \frac{\partial \rho}{\partial n} \right|_b &= 0 \\ \left. \frac{\partial E}{\partial n} \right|_a &= 0 & \left. \frac{\partial E}{\partial n} \right|_b &= 0 \\ \left. \frac{\partial}{\partial n}(\rho v) \right|_a &= 0 & \left. \frac{\partial}{\partial n}(\rho v) \right|_b &= 0. \end{aligned}$$

No próximo capítulo serão explicitados as simulações e resultados alcançados, após as implementações efetuadas.

## Capítulo 4

# Simulações e Resultados

Uma vez feitas as discretizações das equações da Difusão-Advecção e de Euler, estas foram implementadas computacionalmente por meio da linguagem de programação Python para a obtenção dos resultados numéricos de diferentes cenários propostos.

Os códigos próprios desenvolvidos para os dois modelos aqui discutidos, foram executados na versão Python 3.9.7, utilizando o ambiente Jupyter Notebook (executado via Anaconda 2021.11 (64-bit)), em um sistema com as seguintes configurações: 8 GB de RAM, processador 11th Gen Intel(R) Core(TM) i5-1135G7 e sistema operacional Windows 10. As bibliotecas utilizadas para a elaboração de parte do código foram *NumPy* para operações matriciais e cálculo numérico, e *Matplotlib* para a visualização gráfica das soluções.

Estes resultados foram apresentados graficamente, a fim de facilitar a leitura e interpretação dos resultados. As seções a seguir destinam-se à apresentação das simulações efetuadas e dos resultados alcançados, para os dois modelos.

### 4.1 Simulações para a Equação da Difusão-Advecção

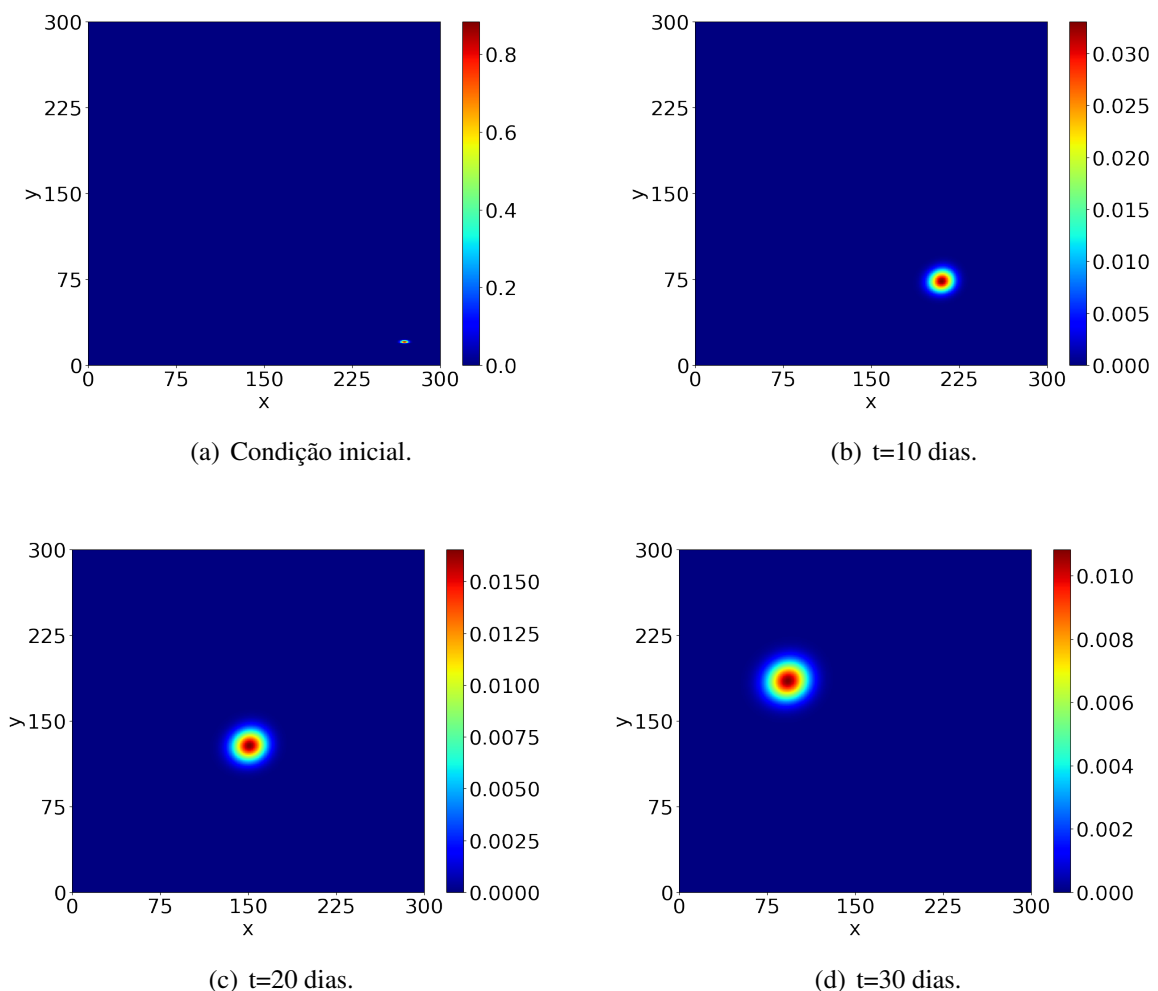
Para uma adequada implementação computacional das equações (3.37), (3.38), (3.39) e (3.40), valores para  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta t$  foram escolhidos de modo a respeitar as condições de estabilidade CFL, dadas pelas equações (3.41) e (3.42). Os valores dos parâmetros de decaimento e de difusão foram retirados do texto de Diniz (2003) [12], entretanto para as simulações dos cenários 3 e 4 foram adotados outros valores para o coeficiente de difusão, para que fosse possível comentar acerca de seu impacto na dispersão do poluente.

Ademais, para todos os quatro cenários que serão apresentados, as dimensões do domínio

são  $L = 300\text{km}$  e  $M = 300\text{km}$  e o tempo final  $t_f = 30$  dias. Junto a esses, ainda para todos os cenários,  $\sigma = 0,0001\text{h}^{-1}$ ,  $\Delta t = 0,1\text{dia}$ ,  $\Delta x = 0,75\text{km}$ ,  $\Delta y = 0,75\text{km}$  e a constante de proporcionalidade  $c_v$ , referente a equação (2.2), adotada foi 3%. Por fim, considerou-se também que nas simulações há inicialmente, quando  $t = 0$ , uma mancha de poluente presente no domínio, sem a presença de fontes.

No primeiro cenário, Figura 4.1, a condição inicial foi  $f(x) = e^{-(y-20)^2-(x-270)0,1}$ . Além disso, foram considerados ventos moderados, compreendidos entre as velocidades de  $5\text{km/h}$  e  $15\text{km/h}$ , mais especificamente ventos de  $10\text{km/h}$ .

Figura 4.1: Gráficos das soluções numéricas para o cenário 1.



Fonte: Elaborado pela autora.

Neste cenário, a correnteza possui menor impacto na movimentação do poluente, de modo que este se desloca na direção dos ventos que atuam sobre o domínio. Isso pode ser observado ao comparar as posições da mancha de poluente nos tempos inicial e final,  $t = 30$  dias, conforme

mostram as Figuras 4.2(a) e 4.2(d), respectivamente.

A difusibilidade adotada neste caso é baixa, com  $\alpha = 0,01 \text{ km}^2/\text{h}$ , logo a maior concentração do poluente se encontra na região central da mancha.

Para o cenário 2, descrito na Figura 4.2, novamente manteve-se o coeficiente de difusibilidade  $\alpha = 0,01 \text{ km}^2/\text{h}$ . Porém nesta situação, a condição inicial é um pouco distinta, com  $f(x) = e^{0,1(-(y-70)^2-(x-160)^2)}$ , isto é, a concentração inicial do poluente está mais simétrica e dispersa.

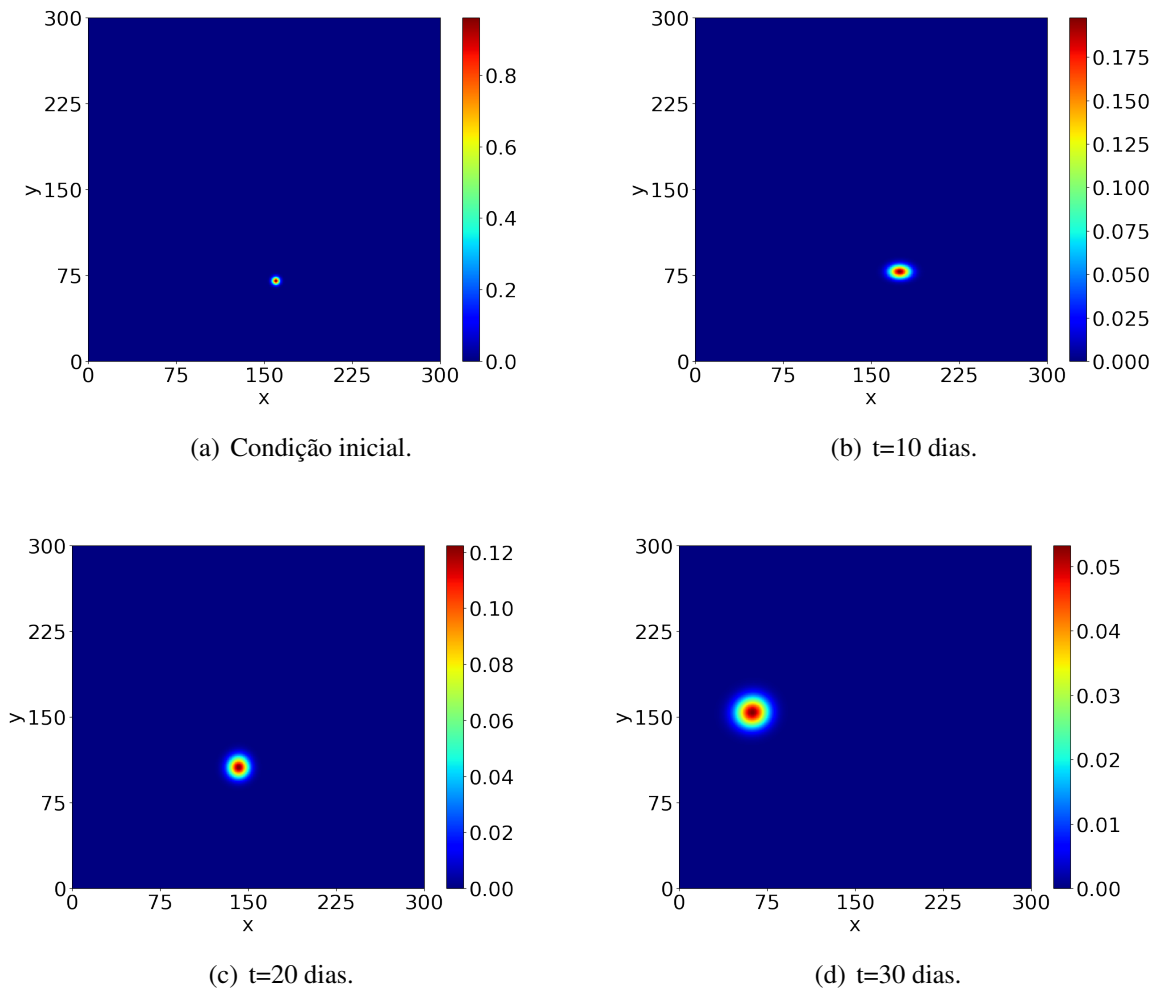
Os ventos que atuam sobre o domínio possuem direção noroeste novamente, entretanto, são ventos fracos com velocidade de  $2 \text{ km}/\text{h}$ . Observa-se na Figura 4.2 que a direção na qual a mancha de poluente se movimenta não corresponde à direção dos ventos, indicando que esse não é o vetor predominante no campo de velocidade do domínio. A maior influência sobre o deslocamento do poluente para o cenário 2, é a correnteza da água.

Outro detalhe que pode ser visto é a dispersão do poluente aparente maior, mesmo possuindo o mesmo coeficiente de difusão que o cenário 1. Tal fato ocorre devido às diferentes condições iniciais. Como já dito, o cenário 2 possui uma mancha de poluente inicial mais dispersa, o que influencia diretamente na condição do poluente ao longo do tempo.

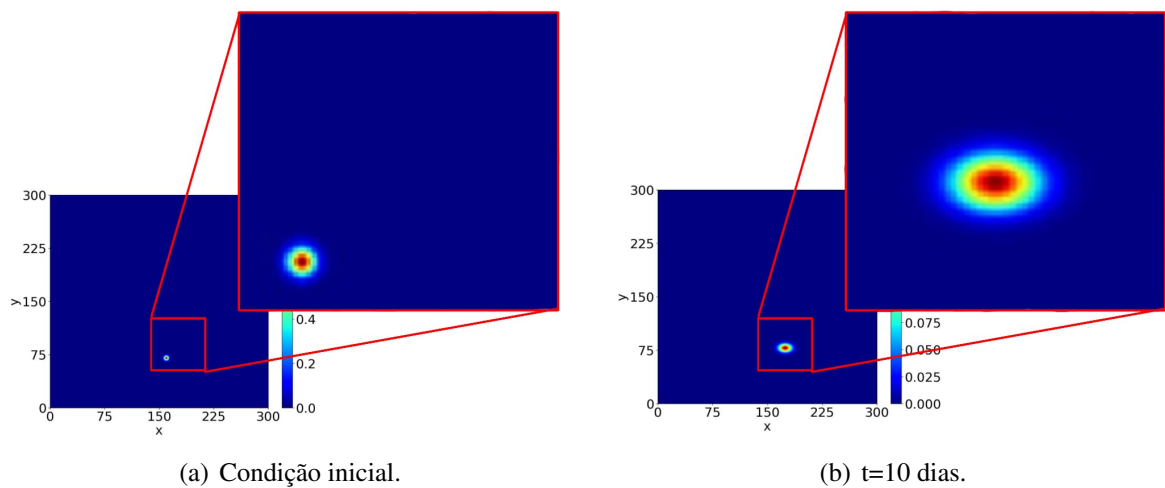
Na Figura 4.3 é possível ver uma aproximação na mancha do poluente para o tempo inicial e decorridos 10 dias. Observe que a mancha, que inicialmente era circular, se torna elíptica ao decorrer do tempo devido a advecção.

O cenário 3, Figura 4.4, como mencionado inicialmente, possui um coeficiente de difusão diferente dos dois primeiros cenários. Neste caso, adotou-se o valor de  $\alpha = 0.1 \text{ km}^2/\text{h}$ , dessa forma, tem-se um cenário com alta difusibilidade. A velocidade dos ventos atribuída foi de  $7 \text{ km}/\text{h}$  na direção nordeste e a condição inicial foi  $f(x) = e^{0,1(-(y-30)^2-(x-30)^2)}$ .

Figura 4.2: Gráficos das soluções numéricas para o cenário 2.

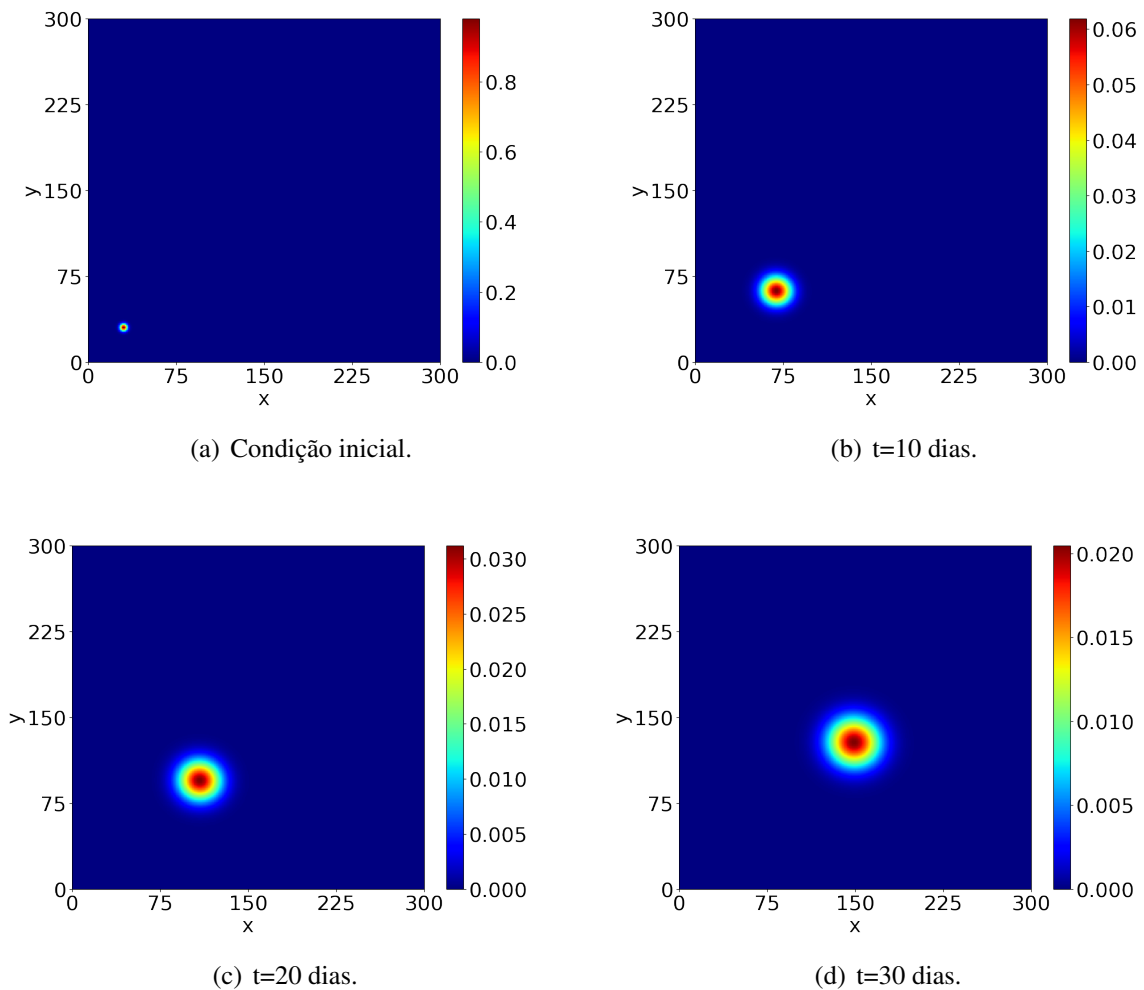


Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 4.3: Aproximação na mancha do poluente do cenário 2 para o tempo inicial e  $t = 10$  dias

Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 4.4: Gráficos das soluções numéricas para o cenário 3.



Fonte: Elaborado pela autora.

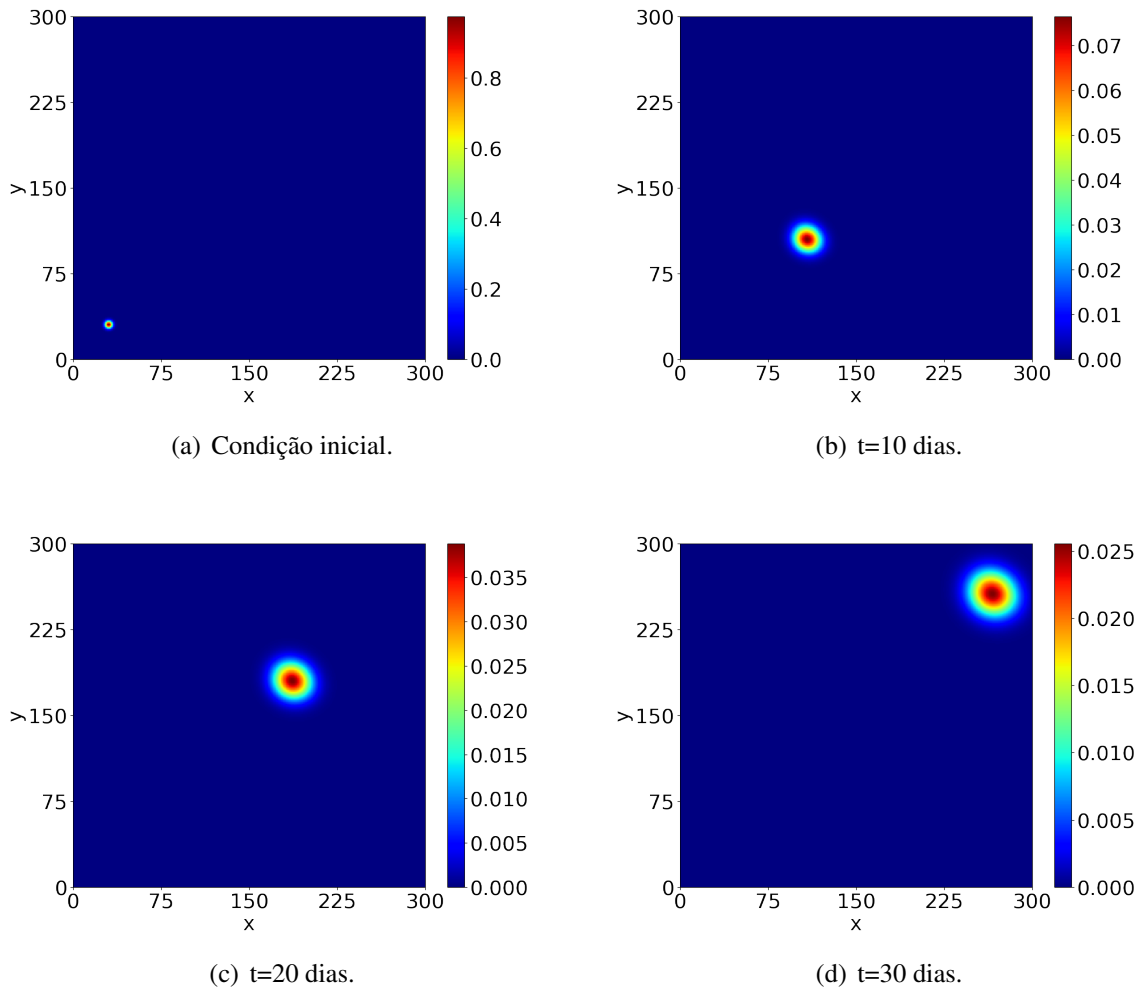
Neste cenário, e no cenário 4, as correntezas foram mantidas em valores baixos, para que pouco influenciassem na movimentação do poluente, de modo que fosse possível voltar mais facilmente a atenção aos diferentes valores definidos para o coeficiente de difusão e regime de ventos.

Note na Figura 4.5(d) que a dimensão da mancha de poluente é maior quando comparada ao resultado obtido pela simulação do cenário 2, Figura 4.3(d), no mesmo período de tempo. Isso ocorre por conta do fenômeno da difusão, responsável por fazer o poluente ir de áreas de maior concentração para de menores concentrações. Essa movimentação do poluente será proporcional ao coeficiente de difusão, por isso ao mudar seu valor, observa-se as variações na dimensão da mancha para os mesmos instantes de tempo.

O último cenário, apresentado na Figura 4.5, possui as mesmas condições inicial e de corren-

teza que o cenário 3, visto. No entanto, sua difusibilidade é média, com valor  $\alpha = 0,015 \text{ km}^2\text{h}$ , e os ventos são fortes, com velocidade de  $15 \text{ km/h}$  na direção nordeste.

Figura 4.5: Gráficos das soluções numéricas para o cenário 4.



Fonte: Elaborado pela autora.

Neste caso, a mancha de poluente se desloca para a direção dos ventos, porém, quando comparado ao cenário 3, observa-se que a distância percorrida ao longo do domínio é maior, chegando a quase alcançar a margem oposta, vide Figuras 4.5(d) e 4.6(d).

A dispersão neste caso é menor quando comparada ao cenário 3, logo há uma maior concentração do poluente na região central da mancha. Não somente isso, mesmo possuindo ventos mais fortes, esses só influenciam no deslocamento do poluente, assim como previsto teoricamente, já que o vetor campo de velocidades  $\vec{W}$ , adotado no modelo, diz respeito ao fenômeno da advecção. Vale lembrar que este fenômeno considera apenas o transporte do poluente, sem que este se degrade ou se modifique no processo. Portanto, o contaminante irá apenas se locomover,

mas não sofrerá quaisquer outras mudanças em sua indentidade.

Nas simulações aqui apresentadas foi possível verificar a movimentação, dispersão e concentração do poluente ao longo do tempo, bem como visualizar a interferência dos parâmetros de difusão e do regime de ventos e correnteza presentes no domínio.

Desse modo, fica evidente a utilidade da modelagem do fenômeno, haja visto que é possível obter uma descrição do comportamento da poluição ao longo do tempo. Com isso, pode se tornar viável a sua implementação para uso na elaboração de estratégias e tomadas de decisões para contenção e limpeza de poluentes, minimizando os danos ambientais causados.

Outras simulações utilizando desse mesmo modelo podem ser vistas no artigo de Rocumba e Silveira (2024) [31]. Para as simulações lá apresentadas, foi considerado como domínio a Lagoa dos Patos, maior laguna do Brasil, localizada na região sul do país. Algumas das simulações ainda consideram o regime de ventos predominante na região, para que se obtenha cenários mais verossímeis.

## 4.2 Simulações e Resultados para as Equações de Euler

As simulações envolvendo o modelo das Equações de Euler, também foram implementadas computacionalmente em linguagem Python - Equações (3.44), (3.45) e (3.46). Há pouco sobre os parâmetros necessários para o modelo na literatura, desse modo as simulações realizadas neste trabalho foram construídas a partir de valores estipulados, visando observar diferentes situações, para então testar o modelo e o código.

Para as simulações dos cenários 1 ao 4 foi considerado um domínio com  $x \in [-2, 2]$  e  $t_f = 0,6$ , assim como adotado em Garcia e Silveira (2017) [15]. Além disso,  $\Delta x = 0,002$ ,  $\Delta t = 0,0002$  e  $\gamma = 1,4$ , valor dado por Hilsenrath, et. al. (1955) [18] para tratar do gás monóxido de carbono.

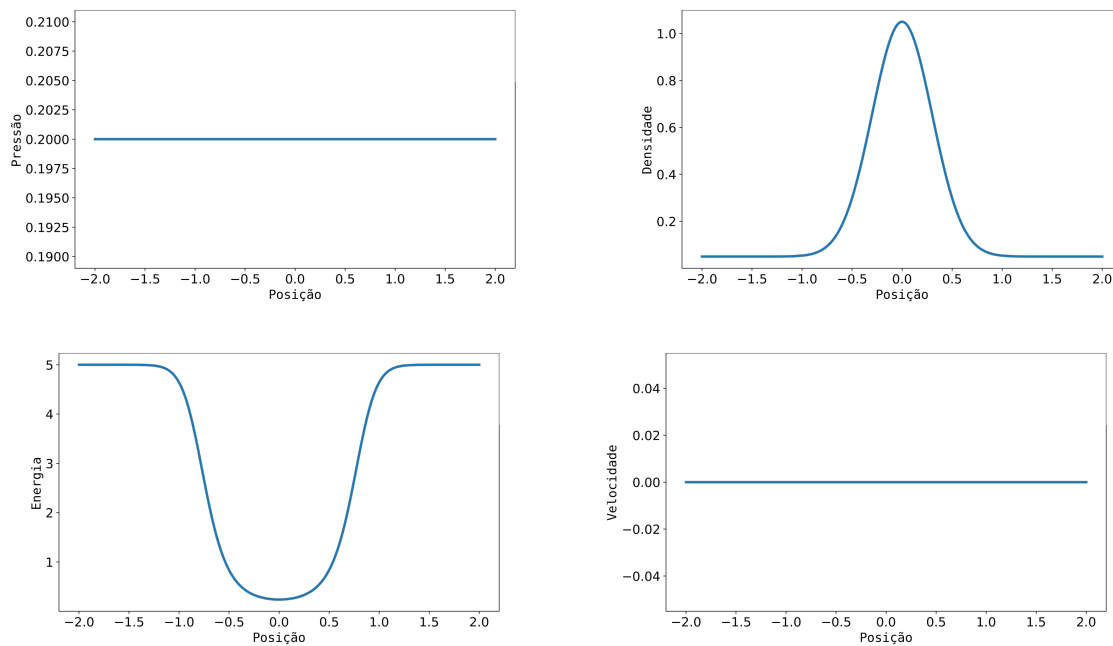
Para o cenário 1 tem-se como condições iniciais a velocidade nula, a pressão baixa equivalendo a  $p = 0,2$  e a densidade sendo dada por uma gaussiana, onde  $f(x) = e^{-[x^2/0,18]} + 0,05$ . Na Figura 4.6 é possível ver as condições iniciais deste cenário.

Já a Figura 4.7 apresenta os resultados finais, quando  $t = 0,6$ , para o primeiro cenário. Note que quando comparado ao estado inicial, a densidade não possui movimento aparente, já que sua velocidade inicial era nula e a final possui valores baixos e que oscilam entre  $-0,06$  e  $0,06$ .

Há também uma pequena mudança de valores na pressão, sendo que próximo ao centro do

domínio, onde está a maior densidade, esta apresenta dois picos. Por outro lado, próximo das bordas ela mantém seu valor inicial de 0.2, não diminuindo portanto seus valores ao longo do tempo.

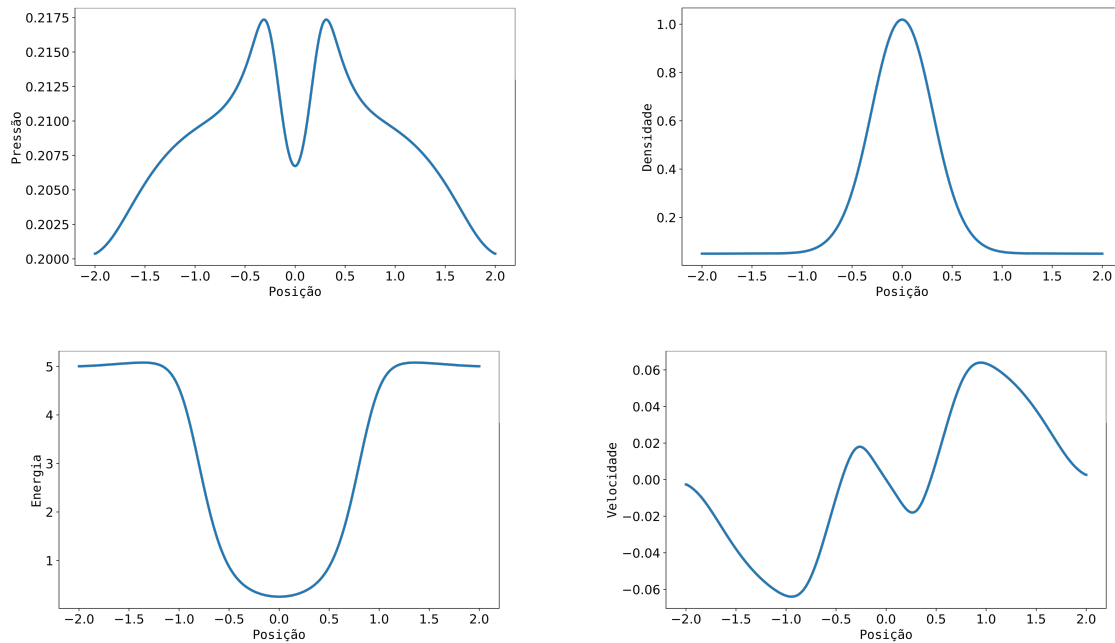
Figura 4.6: Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 1.



Fonte: Elaborado pela autora.

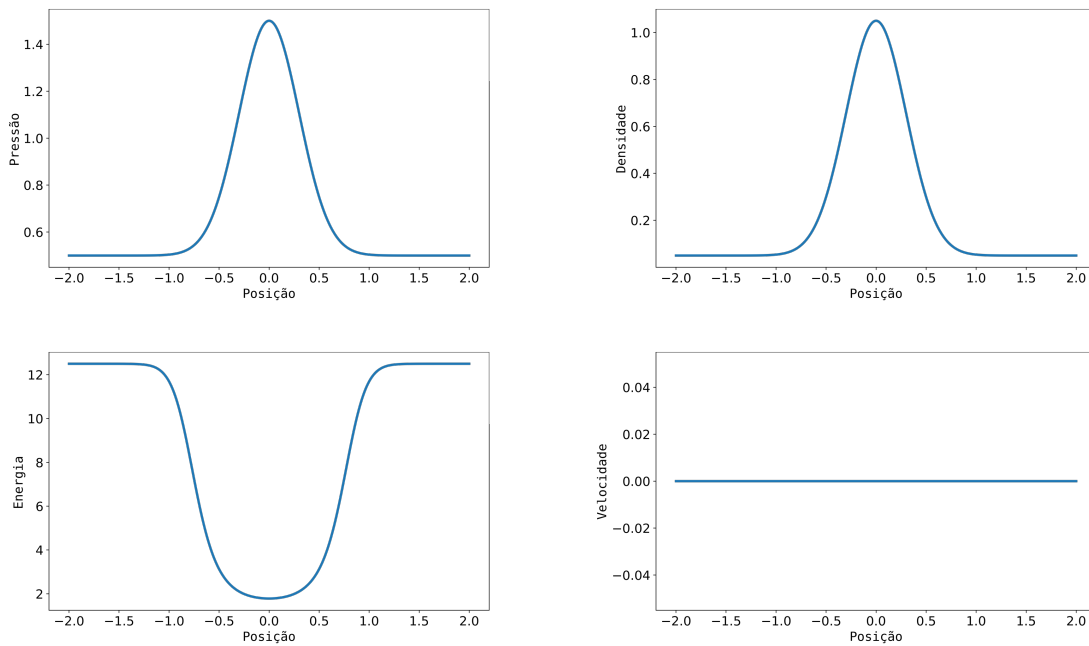
Para o cenário 2 foram mantidas as mesmas condições iniciais da densidade e velocidade, porém neste exemplo, a pressão inicial também passou a ser descrita por uma gaussiana, a saber  $f(x) = e^{-[x^2/0,18]} + 0,5$ . As condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade estão na Figura 4.8.

Figura 4.7: Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 1.



Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 4.8: Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 2.

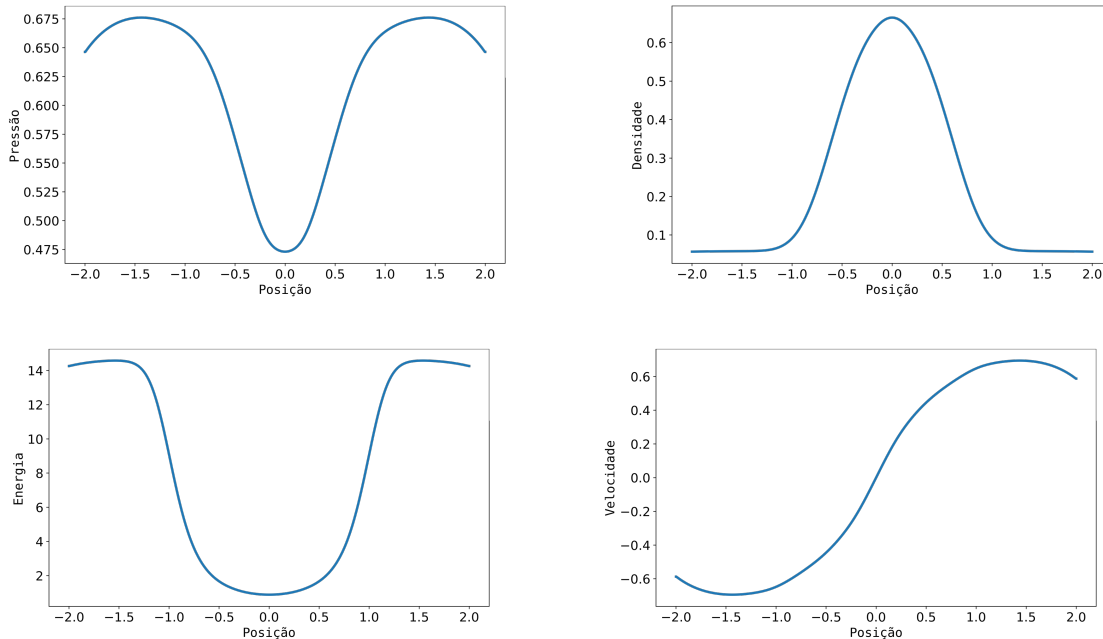


Fonte: Elaborado pela autora.

Assim como no primeiro cenário, neste caso também não há o deslocamento da gaussiana

ao longo do domínio, conforme mostra a Figura 4.9. Porém, é possível notar um achatamento na curva da densidade após o período de tempo.

Figura 4.9: Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 2.



Fonte: Elaborado pela autora.

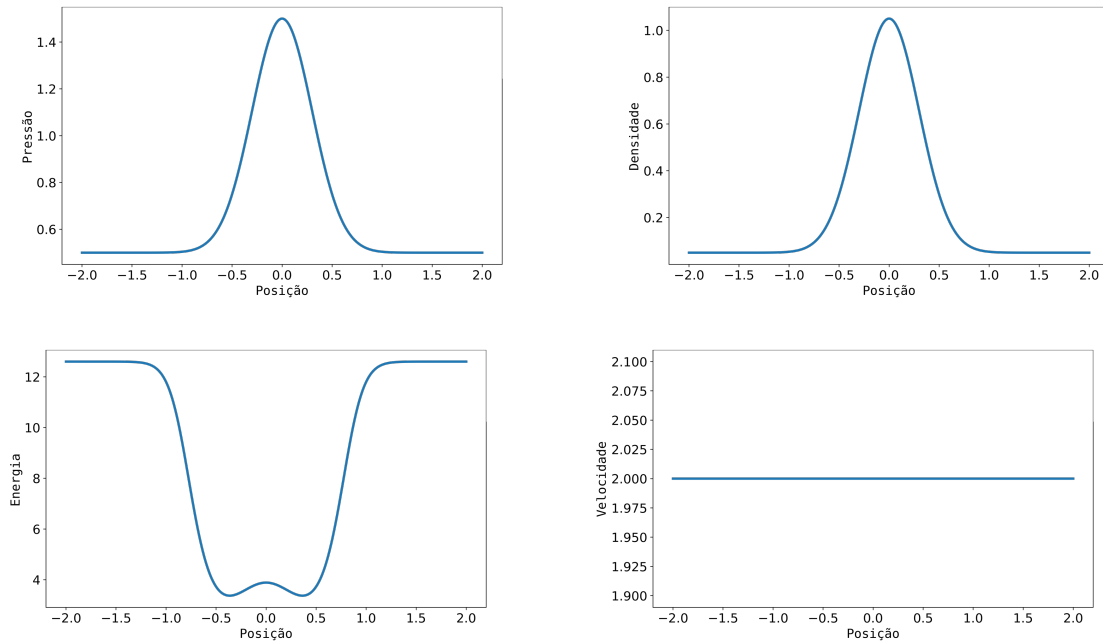
Da mesma forma que no cenário 1, e nos demais cenários que serão apresentados posteriormente, a energia possui os menores valores para as mesmas posições onde a densidade possui os maiores valores, ou seja, em torno do centro da gaussiana. Isso ocorre devido a caracterização da energia interna, que depende inversamente da densidade do fluido.

O cenário 3, que tem as condições iniciais apresentadas na Figura 4.10, mantém as mesmas condições de pressão e densidade que o cenário 2. Por outro lado, neste caso a velocidade inicial passou a ser diferente de zero, sendo atribuído o valor de 2,0.

Note, na Figura 4.11, que devido a velocidade inicial, a região com maior densidade do fluido se desloca para o sentido positivo do eixo. Além disso, assim como no cenário anterior, a curva da densidade é achatada, passando então a ter valores menores no seu pico.

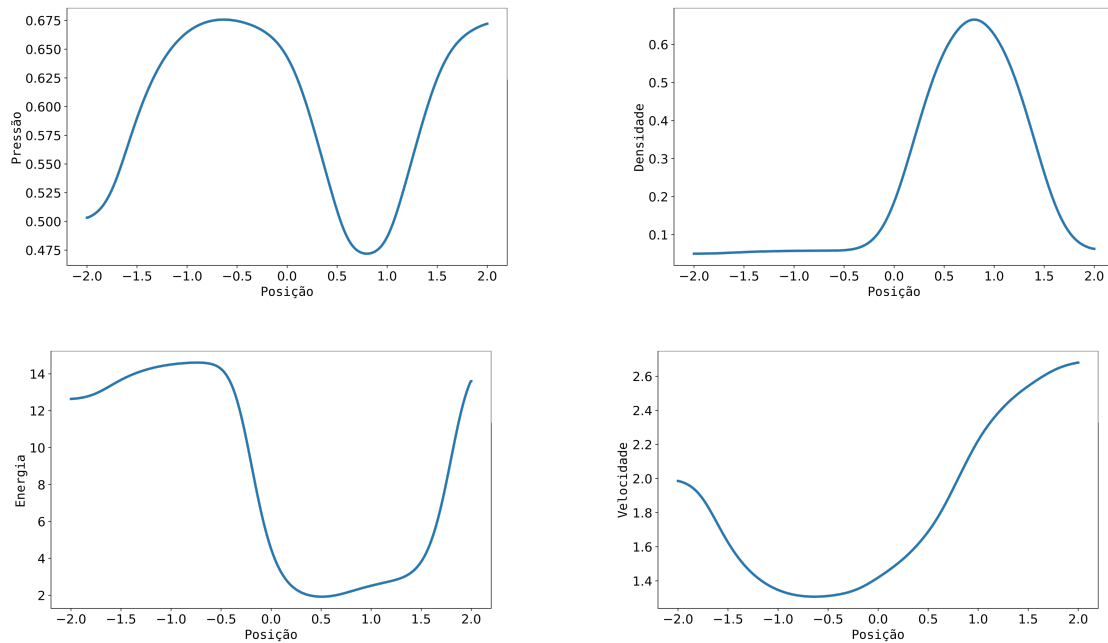
A curva da energia novamente acompanha a tendência da curva da densidade, ou seja, possui seus valores mínimos na região próxima aos valores mais altos da densidade. O comportamento da pressão também possui essa tendência, observe ainda na Figura 4.11 que seu mínimo e seu formato são parecidos com a curva descrita pela energia ao longo do domínio. Essa tendência também pode ser justificada pela relação entre pressão, energia interna e densidade.

Figura 4.10: Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 3.



Fonte: Elaborado pela autora.

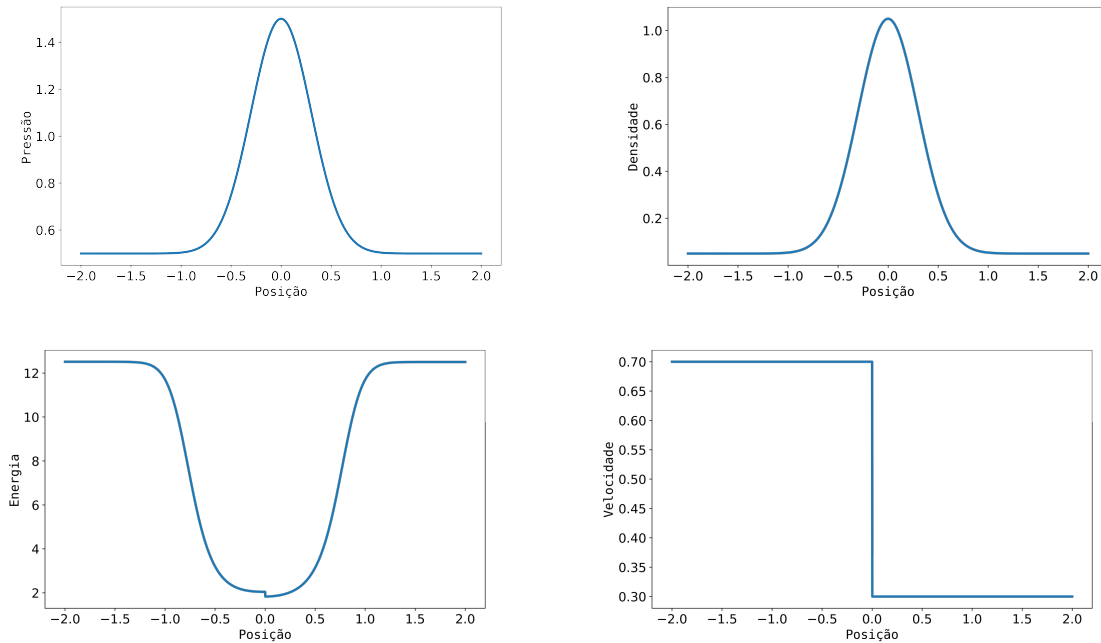
Figura 4.11: Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 3.



Fonte: Elaborado pela autora.

Por fim, o quarto cenário se difere do cenário 3 por possuir uma velocidade não linear, havendo um salto entre seus valores antes e depois da posição central  $x = 0$ . A Figura 4.12 contém as condições iniciais para este caso.

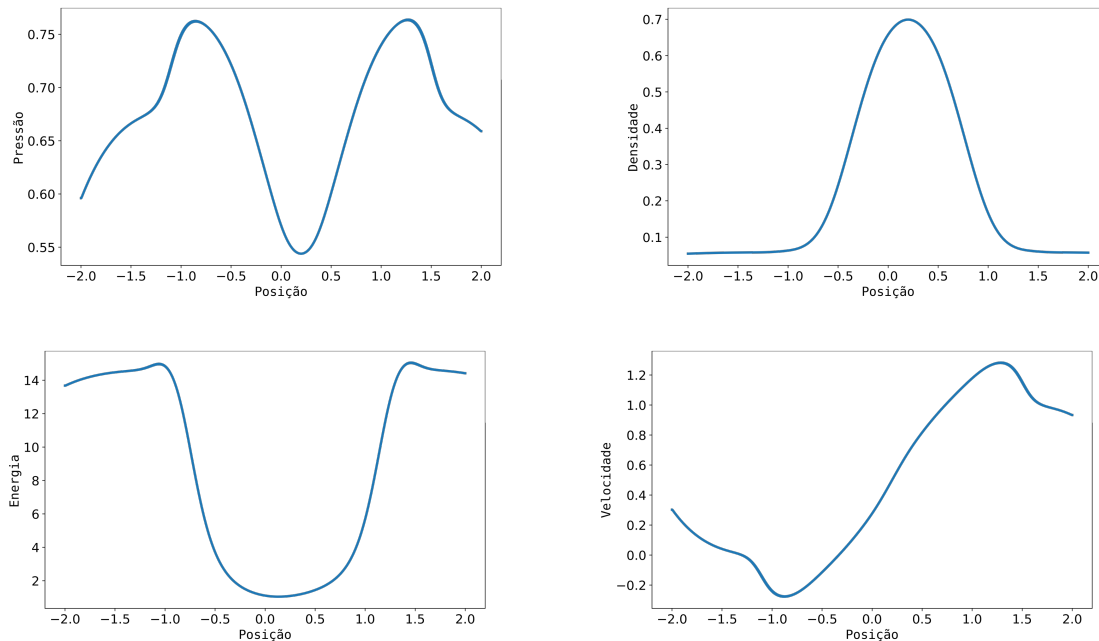
Figura 4.12: Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 4.



Fonte: Elaborado pela autora.

Na Figura 4.13 é possível observar as condições finais para este cenário. Note que a energia e pressão mantêm suas curvas com tendências opostas a curva da densidade, em conformidade com o que já foi discutido. Por outro lado, a densidade final possui um leve deslocamento na direção positiva do eixo, entretanto menos expressivo que no cenário 3. Isso é justificado pela diferença nos valores de velocidade inicial, que para o cenário 3 foi considerada maior.

Figura 4.13: Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 4.



Fonte: Elaborado pela autora.

### 4.2.1 Queimadas no Pantanal

O Pantanal é um bioma situado no sul do estado de Mato Grosso e noroeste do estado de Mato Grosso do Sul, no Brasil, além de conter partes no leste da Bolívia e norte do Paraguai. A Figura 4.14 mostra um mapa com sua localização.

Como um último cenário, a fim de se ter um caso mais verossímil, consideramos as queimadas que ocorreram no mês de junho deste ano, no Pantanal do estado de Mato Grosso do Sul, e que a poluição provocada pela fumaça chegou até algumas cidades do estado de São Paulo.

Logo, para a simulação estabeleceu-se a fumaça partindo da cidade de Corumbá-MS e atingindo a cidade de São José dos Campos-SP; ambas as cidades podem ser visualizadas no mapa apresentado na Figura 4.15.

Com auxílio do Google Maps foi calculada a distância entre as duas cidades, vide Figura 4.16. O valor obtido foi equivalente a  $1.315,55\text{ km}$ . Outra informação importante é que a poluição atingiu a cidade de São José dos Campos no dia 27/06/2024, assim como datado pela notícia veiculada pelo site G1 (2024) [14].

Para definir o início dos focos de incêndio, foram examinadas imagens de satélite da região, disponibilizadas pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE). A Figura 4.17 exhibe

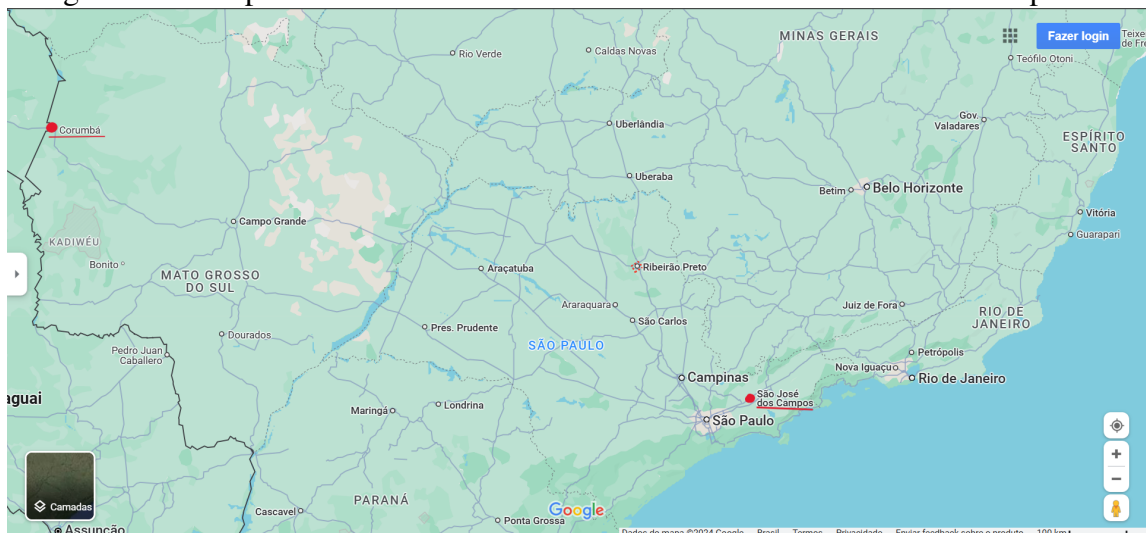
Figura 4.14: Localização do Bioma Pantanal.



Fonte: Site Ambiente Brasil. Disponível em:

[https://ambientes.ambientebrasil.com.br/natural/biomas/pantanal\\_-\\_localizacao\\_e\\_caracterizacao.html](https://ambientes.ambientebrasil.com.br/natural/biomas/pantanal_-_localizacao_e_caracterizacao.html)

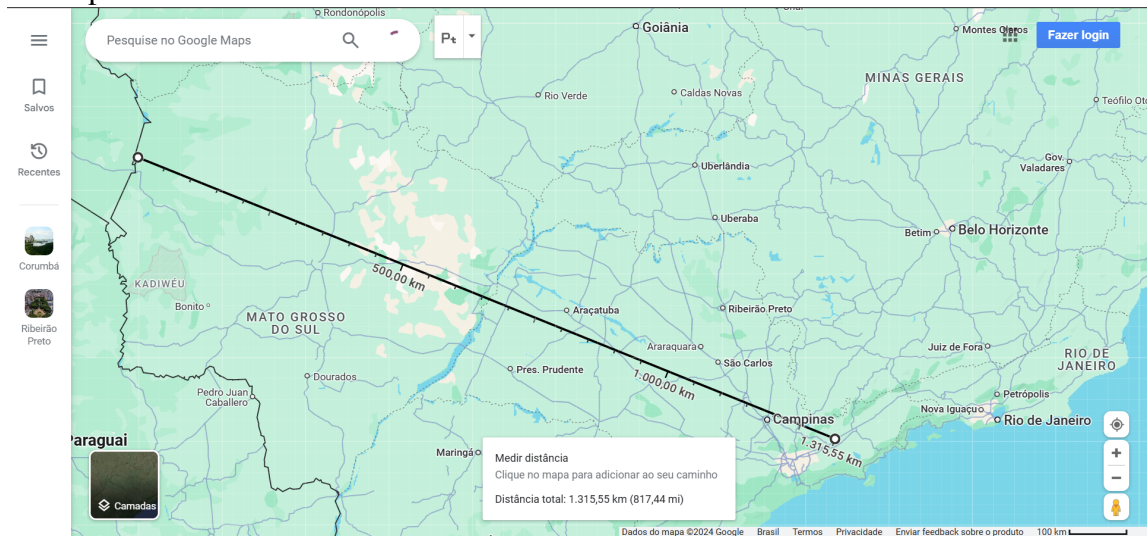
Figura 4.15: Mapa indicando as cidades de Corumbá-MS e São José dos Campos-SP.



Fonte: Captura de tela do Google Maps. Disponível em:

[https://www.google.com/maps/@-21.2915716,-48.8226893,6z?entry=ttu&g\\_ep=EgoyMDI0MT EyNC4xIKXMDSoASAFQAw%3D%3D](https://www.google.com/maps/@-21.2915716,-48.8226893,6z?entry=ttu&g_ep=EgoyMDI0MT EyNC4xIKXMDSoASAFQAw%3D%3D)

Figura 4.16: Captura de tela indicando a distância entre as cidades de Corumbá-MS e São José dos Campos-SP.



Fonte: Captura de tela do Google Maps. Disponível em:

[https://www.google.com/maps/place//@-20.6181646,-50.2648975,6.55z/data=!4m6!3m5!1s0x9387a076798e7565:0x5e7c4a2bdbaeab6!8m2!3d-19.0049966!4d-57.6521301!16zL20vMDRyczdf?entry=ttu&g\\_ep=EgoyMDI0MTEyNC4xIKXMS0ASAFQAw%3D%3D](https://www.google.com/maps/place//@-20.6181646,-50.2648975,6.55z/data=!4m6!3m5!1s0x9387a076798e7565:0x5e7c4a2bdbaeab6!8m2!3d-19.0049966!4d-57.6521301!16zL20vMDRyczdf?entry=ttu&g_ep=EgoyMDI0MTEyNC4xIKXMS0ASAFQAw%3D%3D).

as imagens de satélite referentes ao dia 20/06/2024. Os pontos vermelhos indicam os focos de incêndio, sendo possível visualizar também a fumaça próxima à região de Corumbá-MS.

Figura 4.17: Captura de tela indicando os focos de incêndio do dia 20 de junho de 2024, entre os estados de Mato Grosso do Sul e São Paulo.



Fonte: Captura de tela do site BDQUEIMADAS. Disponível em:

<https://terrabilis.dpi.inpe.br/queimadas/bdqueimadas/#>.

Logo, o tempo de início para as simulações foi o dia 20/06/2024 e como tempo final, o dia 27/06/2024. Essas escolhas se basearam em notícias jornalísticas da época, que divulgaram que

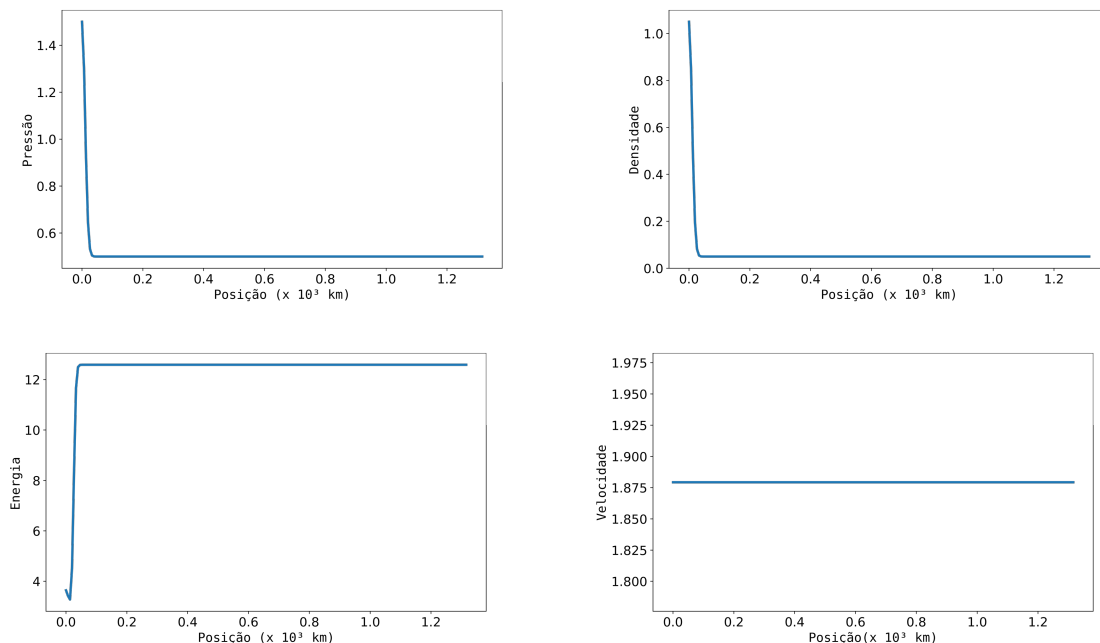
a fumaça levou cerca de 7 dias para se deslocar até o estado de São Paulo. Considerando a distância entre as duas cidades, pode-se assumir que a velocidade média do deslocamento foi de  $187,94\text{km}/\text{dia}$ .

Para o cenário 5 tem-se então,  $t_0 = 0$ ,  $t_f = 0,7$ ,  $v = 1,8794$ ,  $x \in [0, 1,31555]$  e novamente  $\gamma = 1,4$  já que o valor é para o monóxido de carbono, presente na fumaça das queimadas. Como condição inicial da densidade foi considerada a função  $f(x) = e^{-[x^2/0,0002]} + 0,05$  e para a pressão,  $f(x) = e^{-[x^2/0,0002]} + 0,5$ , ademais  $\Delta t = 0.00035$  e  $\Delta x = .00657775$ . As condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade estão explicitadas na Figura 4.18.

As condições finais deste cenário estão na Figura 4.19. Note que a densidade na região onde se encontra a cidade de São José dos Campos é baixa, quando comparada aos  $400\text{km}$  mais próximos à região de incêndios.

Mesmo assim, ainda é possível observar que a fumaça atinge a região de São José dos Campos, assim como de fato ocorreu, e que a densidade de poluente se torna menor na região de Corumbá-MS com o passar do tempo, se espalhando pelo domínio.

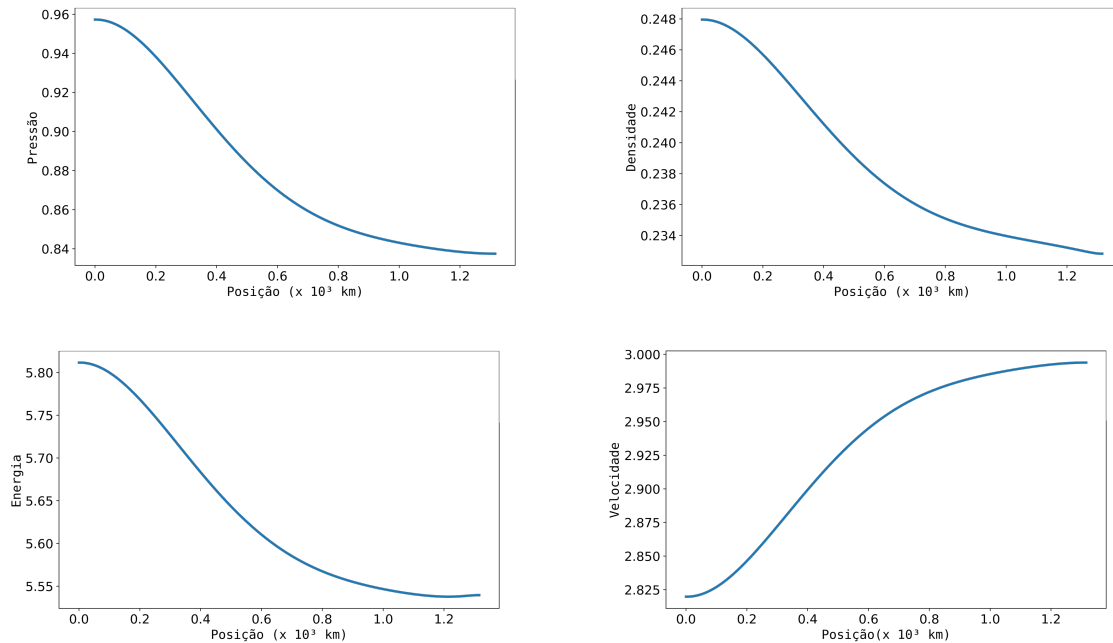
Figura 4.18: Condições iniciais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 5.



Fonte: Elaborado pela autora.

Embora modelo seja unidimensional e possua algumas limitações de uso, os cenários aqui apresentados evidenciam a sua utilidade. Com as implementações computacionais e os cálculos das soluções numéricas se torna possível realizar estimativas e previsões quanto à evolução

Figura 4.19: Soluções numéricas finais de pressão, densidade, energia e velocidade, para o cenário 5.



Fonte: Elaborado pela autora.

temporal da densidade, pressão e velocidade, além da energia, de um fluido, aqui adotado como o gás monóxido de carbono.

As diferentes situações apresentadas, apesar de carecerem de mais dados reais, demonstram a versatilidade da modelagem matemática, destacando sua funcionalidade em diferentes situações. E, portanto, assim como ocorre para a Equação da Difusão-Advecção, este modelo composto pelas Equações de Euler pode auxiliar na elaboração de estratégias e tomada de decisões que visam minimizar os danos sofridos pelos ecossistemas e pelas populações humanas, devido a agentes poluidores.

## Capítulo 5

### Considerações Finais

A poluição que afeta o equilíbrio ambiental, está diretamente ligada à saúde das pessoas. A presença de contaminantes, seja na água, no solo ou no ar, favorece o surgimento e a proliferação de uma série de doenças. As consequências são catastróficas para os ecossistemas e para humanidade; vão desde a falta de água potável, comida adequada, ar limpo para respirar, até problemas neurológicos, cardíacos, pulmonares, cânceres, dentre outros. Sem mencionar os custos elevados, gerados para os países e governos, com emergências sanitárias, vacinas, tratamentos, ações para auxiliar os refugiados climáticos, combate a incêndios, desmatamentos e para tentar frear a destruição dos recursos naturais. Diante disso, práticas adequadas de manejo de resíduos, tratamento de esgoto e controle da poluição são necessárias e urgentes, para proteger o mundo em que vivemos, bem como a saúde pública.

As simulações computacionais executadas neste trabalho, permitiram analisar o comportamento de um poluente ao longo do tempo, utilizando os modelos da Equação da Difusão-Advecção e das Equações de Euler. Também foi possível observar as posições no domínio onde a concentração de poluentes é maior e qual a trajetória percorrida pelo contaminante, ao longo de um período.

Somando-se a isso, está atrelado o fato dos resultados serem apresentados graficamente, o que corrobora com a compreensão e interpretação destes. Ademais, a compreensão detalhada desses processos, por meio da modelagem matemática e das simulações, pode fornecer subsídios valiosos para a adoção de políticas públicas de controle, mitigação e prevenção de danos ambientais, evitando, portanto, maiores danos e prejuízos ecossistêmicos.

Dessa forma, os objetivos inicialmente propostos foram completados, haja visto que as simulações foram realizadas e interpretadas, viabilizando afeir conclusões sobre a dispersão, con-

centração e deslocamento de poluentes em meios aéreos e aquáticos.

As condições de contorno e delimitação do domínio para a Equação a Difusão-Advecção foram simplificações realizadas para tornar o modelo matemático tratável numericamente. Da mesma forma, as Equações de Euler unidimensionais, também consistiram numa simplificação necessária para manter o escopo deste Trabalho de Conclusão de Curso. Em ambos os casos, apesar das simplificações efetuadas, os resultados obtidos são satisfatórios e vão de acordo com o esperado. Sugere-se como pesquisas futuras, estudos mais aprofundados envolvendo diferentes métodos numéricos, distintas caracterizações do domínio e a busca por dados reais sobre a temática.

## Referências Bibliográficas

- [1] ALLOWAY, B. J.; AYRES, D. C. Introduction. *In*: ALLOWAY, B. J.; AYRES, D. C. **Chemical Principles of Environmental Pollution**. 2nd ed. London: CRC Press, 1997.
- [2] ARIS, R. **Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. New York: Dover Publications Inc, 1962.
- [3] BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática**. 3ª ed. São Paulo: Editora Contexto, 2002.
- [4] BASSANEZI, R. C. **Temas e modelos**. Santo André: UFABC, 2012.
- [5] BATCHELOR, G. K. **An Introduction to Fluid Dynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [6] BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de transporte**. 2ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017.
- [7] BOYCE W. E; DIPRIMA, R. C. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno**. 10ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2015.
- [8] CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Cubatão comemora quatro décadas de Vale com Vida. **CETESB**, 14 mar. 2024a. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/blog/2024/03/14/cubatao-comemora-quatro-decadas-de-vale-d-a-vida/>. Acesso em: 07 dez. 2024.
- [9] CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Mortandade de peixes no Rio Piracicaba: CETESB conclui laudo e multa empresa em R\$18 milhões pelo desastre ecológico. **CETESB**, 19 jul. 2024b. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/blog/2024/07/19/mortandade-de-peixes-no-rio-piracicaba-cetesb-conclui-laudo-e-multa-empresa-em-r18-milhoes-pelo-desastre-ecologico/#:~:>

text=A%20CETESB%20identificou%20a%20rela%C3%A7%C3%A3o,epis%C3%B3dios%20de%20mortalidade%20de%20peixes. Acesso em: 28 nov. 2024.

- [10] CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. New York: McGraw-Hill, 1997. Reissued, Illinois: Waveland Press, 2008.
- [11] COELHO, T. Cidades de São Paulo lideram ranking de poluição do ar no Brasil, aponta estudo. **CNN Brasil**, 27 out. 2024. Disponível em: <https://www.cnnbrasil.com.br/nacional/cidades-de-sao-paulo-lideram-ranking-de-poluicao-do-ar-no-brasil-aponta-estudo/>. Acesso em: 26 nov. 2024.
- [12] DINIZ, G. L. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água**: modelagem, aproximações e aplicações. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Campinas, 2003.
- [13] EDELSTEIN-KESHET, L. **Mathematical Models in Biology**. Philadelphia: SIAM, 2005.
- [14] G1. Fumaça do Pantanal avança pelo país e atinge pelo menos 19 cidades do Vale do Paraíba e litoral norte de SP. **G1**, 27 jun. 2024. Disponível em: <https://g1.globo.com/sp/vale-do-paraiba-regiao/noticia/2024/06/27/fumaca-do-pantanal-avanca-pelo-pais-e-atinge-pelo-menos-19-cidades-do-vale-do-paraiba-e-litoral-norte-de-sp.ghtml>. Acesso em: 28 nov. 2024.
- [15] GARCIA, R. de O.; SILVEIRA, G. P. Métodos numéricos aplicados às equações de Euler: comparação entre MatLab, Octave e Fortran. **C.Q.D. - Revista Eletrônica Paulista de Matemática**, Bauru, v. 11, p. 65-88, 2017.
- [16] GREENPEACE. Relatório Anual Greenpeace Brasil 2023. **Greenpeace**, 2023. Disponível em: <https://www.greenpeace.org/static/planet4-brasil-stateless/2024/08/be7b50ff-relatorio-anual-2023-greenpeace-brasil.pdf>. Acesso em: 28 nov. 2024.
- [17] GUACA, D. C.; SILVA, J.F. R.; MEYER J. F. C. A. Método de Diferenças Finitas para a modelagem e simulação da dispersão de poluentes em meios aquáticos. **Biomatemática**, v. 25, p. 45-58, 2015.

- [18] HILSEN RATH, J.; et al. **Tables of Thermal Properties of Gases**. Washington: U. S. Department of Commerce, 1995.
- [19] INFORZATO, N. F. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água**: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional. Tese (Doutorado em matemática aplicada) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.
- [20] JÚNIOR, V. A.; GRAMANI, L. M.; KAVISKI, E. Modelagem computacional da ruptura de barragem. **Revista de engenharia e tecnologia**, v. 7, n. 3, p. 222-237, 2015.
- [21] LEVEQUE, R. J. **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems**. SIAM:2007.
- [22] LEVEQUE, R. J. **Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems**. Cambridge University Press, 2002.
- [23] LINGE, S.; LANGTANGEN, H. P. **Programming for Computations-Python: A Gentle Introduction to Numerical Simulations with Python**. 1st ed. *[S. l.]*: Springer, 2016.
- [24] MARCHUK, G. I. **Mathematical models in environmental problems**. Studies in Mathematical and its Applications, Vol. 16. North-Holland, Amsterdam: The Netherlands, 1986.
- [25] MORAES, A. N. **Crítério de Estabilidade de um Esquema Explícito em Diferenças Finitas para o Modelo de Placas de Mindlin-Timoshenko**. Dissertação (Mestrado em Matemática) – Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, Belém, 2019.
- [26] MORTON, K. W.; MAYERS, D. F. **Numerical Solution of Partial Differential Equations**. 2nd ed. Cambridge University Press, 2005
- [27] OLIVEIRA, R. F. **O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande, RJ**: modelagem, análise numérica e simulações. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2003.

- [28] PEIRCE, J. J.; WEINER, R. F.; VESILIND, P. A. **Environmental Pollution and Control**. 3rd ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990.
- [29] POTT, C. M.; ESTRELA, C. C.. Histórico ambiental: desastres ambientais e o despertar de um novo pensamento. **Estudos Avançados**, v. 31, n. 89, p. 271–283, jan. 2017.
- [30] PRITCHARD, P. J.; MITCHELL, J. W. **Introduction to fluid mechanics, Fox and McDonald's**. 9th ed. New York: John Wiley & Sons, 2015.
- [31] ROCUMBA, L. V. R.; SILVEIRA, G. P. Modelagem e simulações da dispersão de poluentes na Lagoa dos Patos. **BRAZILIAN ELECTRONIC JOURNAL OF MATHEMATICS**, Uberlândia, v. 5, p. 1–20, 2024. DOI: 10.14393/BEJOM-v5-2024-72489.
- [32] RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo numérico: Aspectos teóricos e computacionais**. 2ª ed. São Paulo: Pearson, 1996.
- [33] SANTANA, N. B. **Estudo da dispersão de poluentes na lagoa Pampulha utilizando equações diferenciais parciais acopladas a controladores Fuzzy**. Tese (Doutorado em matemática aplicada) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2019.
- [34] UNESCO- ORGANIZAÇÃO DAS NAÇÕES UNIDAS PARA A EDUCAÇÃO, A CIÊNCIA E A CULTURA . Relatório Mundial das Nações Unidas sobre Desenvolvimento dos Recursos Hídricos 2021: O valor da água. Tradução realizada com apoio das Representações da UNESCO, da FAO e da UN Global Compact no Brasil. Paris: UNESCO, 2021. Disponível em: <http://www.unesco.org/water/wwap>. Acesso em: 28 nov. 2024.
- [35] VALLERO, D. A. **Fundamentals of air pollution**. 4th ed. San Diego: Academic Press, 2008.