

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Modelagem Matemática do Espalhamento do Poluente Mercúrio na Água

por

Adelaida Otazu Conza

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli
Orientador

Porto Alegre, Julho de 2017.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Conza, Adelaida Otazu

Modelagem Matemática do Espalhamento do Poluente Mercúrio na Água / Adelaida Otazu Conza.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2017.

68 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2017.

Orientador: De Bortoli, Álvaro Luiz

Dissertação: Matemática Aplicada, Concentração, Espalhamento, Poluição, Modelagem Matemática, Solução Numérica, Solução Analítica

Modelagem Matemática do Espalhamento do Poluente Mercúrio na Água

por

Adelaida Otazu Conza

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em
Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Dinâmica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli

Banca examinadora:

Profa. Dra. Eliete B. Hauser
FAMAT-PUCRS

Prof. Dra. Janaina P. Zingano
DMPA-UFRGS

Profa. Dr. Leonardo P. Bonorino
PPGMAT-UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
31 de Julho de 2017.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

A meus pais Julia e Faustino.

AGRADECIMENTO

À minha família Diane e Walter pelo apoio constante, por acreditar em mim, e entender minha ausência.

À meus pais, irmãos Wilber, Marina, Francisco e Pedro, pelo apoio.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli pela orientação e paciência.

Às colegas e amigas Marline e Joice pela amizade, pela ajuda e companhismo.

Ao PPGMap, pela oportunidade.

Ao CNPq pelo suporte financeiro, sem o qual este trabalho não seria possível.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	xi
RESUMO	xiv
ABSTRACT	xv
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação	2
1.2 Objetivos	3
1.3 Organização do Trabalho	3
2 MERCÚRIO	5
2.1 Ciclo Biogeoquímico do Mercúrio	6
2.2 Transporte e Transformação do Mercúrio no Ambiente Áquatico	8
3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO ESCOAMENTO DE FLUIDOS	11
3.1 Conservação da Massa	13
3.2 Conservação da Quantidade de Movimento	14
3.3 Conservação da Energia	17
3.4 Conservação da Espécie Química	19
4 PROCEDIMENTO DA SOLUÇÃO	24
4.1 Definição do Modelo Matemático	24
4.2 Adimensionalização das Equações	25
4.2.1 Condições Iniciais e Condições de Contorno	28

4.3	Diferenças Finitas	30
4.4	Método Iterativo de Gauss Seidel	34
4.4.1	Convergência do Método Iterativo de Gauss Seidel	35
4.4.2	Relaxação para Resolver Sistemas Lineares	36
4.4.3	Geração da Malha Computacional	38
4.5	Análise de Consistência e Estabilidade	38
4.5.1	Consistência	39
4.5.2	Análise de Estabilidade	41
5	RESULTADOS	48
5.1	Solução Analítica	48
5.2	Solução Numérica	58
6	CONCLUSÕES E CONTRIBUIÇÕES	61
6.1	Contribuições	61
6.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	62
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63

Lista de Figuras

Figura 2.1	Ciclo do mercúrio no ambiente aquático [4].	7
Figura 4.1	Condições de contorno do modelo	30
Figura 4.2	Diferenças finitas unidimensional	30
Figura 4.3	Interpretação geométrica de diferenças finitas	32
Figura 4.4	Diferenças finitas (bidimensional)	33
Figura 4.5	Malha bidimensional	38
Figura 5.1	Isolinhas de concentração da solução analítica	58
Figura 5.2	Isolinhas de concentração da solução numérica	59
Figura 5.3	Comparação da solução analítica e numérica: isolinhas de concentração	60

Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Mercúrios orgânicos e inorgânicos [40]	5
Tabela 2.2	Propriedades atômicas e físicas do mercúrio	5
Tabela 5.1	Dados do modelo	48
Tabela 5.2	Dados do modelo analítico	57

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

<i>DCF</i>	Dinâmica de Fluidos Computacional
<i>BRS</i>	Bactéria Redutora de Sulfato
<i>EDP</i>	Equações Diferenciais Parciais
<i>EDF</i>	Equações de Diferenças Finitas
<i>SOR</i>	Sobre-Relaxação Sucessiva

Lista de Símbolos

k_x	- coeficiente de difusão no eixo x
k_y	- coeficiente de difusão no eixo y
C	- concentração
R	- constante dos gases perfeitos
E_a	- energia de ativação
e	- energia interna
Q	- fluxo de calor
\mathbf{J}	- fluxo molar
M	- peso molecular
p	- pressão
T	- temperatura
S	- termo fonte
ΔE	- variação de energia
u	- velocidade

Símbolos Gregos

ρ - massa específica

μ - viscosidade cinemática

ν - viscosidade dinâmica

RESUMO

O objetivo deste trabalho é a modelagem matemática da propagação do poluente mercúrio na água. O modelo bidimensional consiste na drenagem da água através de um canal, onde o poluente (mercúrio) entra. O modelo consiste em um conjunto de equações diferenciais parciais: as equações para a conservação da massa, a quantidade de movimento, e a concentração das espécies, sujeitas a condições iniciais e de contorno apropriadas. Estas equações foram discretizadas pelo método de diferenças finitas centrais, gerando sistemas lineares que foram resolvidos pelo método de Gauss-Seidel e a convergência foi acelerada usando a técnica de sobre-relaxações SOR. A análise da consistência e estabilidade da equação de concentração foi feita. Além disso, a solução analítica da equação de concentração, que é uma equação diferencial parcial bidimensional não homogênea com uma condição de contorno não homogênea, foi obtida com a transformada de Laplace. Os resultados obtidos a partir do modelo numérico e da solução analítica foram comparados e apresentam concordância razoável.

Palavras-chave: Concentração; Espalhamento; Poluição; Modelagem Matemática; Solução Numérica; Solução Analítica.

ABSTRACT

The goal of this work is the mathematical modeling of the spreading of the polluting mercury in the water. The two-dimensional model consists of water drainage through a canal, where the pollutant (mercury) enters. The model consists of a set of partial differential equations: the equations for the conservation of the mass, the momentum, and the concentration of the species, subject to appropriate initial and boundary conditions. These equations were discretized by the method of central finite differences, generating linear systems, which were solved by the Gauss-Seidel method and convergence was accelerated using the over-relaxation SOR technique. The analysis of the consistency and stability of the concentration equation was made. Furthermore, the analytical solution of the concentration equation, which is a two-dimensional non-homogeneous partial differential equation with one non-homogeneous contour condition, was obtained using Laplace transform. The results obtained from the numerical model and the analytical solution were compared and presented reasonable agreement.

Keywords: Concentration; Spreading; Pollution; Mathematical Modeling; Numerical Solution; Analytical Solution.

1 INTRODUÇÃO

O mercúrio é um contaminante ambiental perigoso. No Japão, aproximadamente 2252 pessoas foram afetadas e 1043 morreram devido à doença de Minamata [22], causada pela poluição elevada por mercúrio de uma indústria química. Estudos de toxicologia também demonstraram que o mercúrio, especialmente o metilmercúrio (MeHg), é muito tóxico para o embrião humano e seu feto. O MeHg é a forma mais tóxica de mercúrio. Em sistemas aquáticos, a bioacumulação através da cadeia alimentar pode causar altos níveis de contaminação por mercúrio em peixes, mesmo em concentrações muito baixas de MeHg na água. Nos sistemas aquáticos, o mercúrio existe em formas elementares, inorgânicas e orgânicas. O mercúrio elementar Hg^0 é o único metal em forma líquida à temperatura ambiente, tem alta volatilidade e relativamente baixa solubilidade em água. A literatura indica que as fontes de atividade humana mais importantes de poluição por mercúrio em sistemas aquáticos são: (1) deposição atmosférica, (2) erosão, (3) descargas urbanas, (4) materiais agrícolas, (5) mineração e (6) combustão e descargas industriais [53].

Para obter a concentração de um poluente na água, utilizaremos a dinâmica de fluidos computacional DFC, que fornece a aproximação numérica das equações que governam o movimento do fluido. Estas são um conjunto de equações diferenciais parciais, EDPs. Essas equações são discretizadas para produzir sistemas algébricos de equações. O método de solução pode ser direto ou iterativo. As condições iniciais e as condições de contorno do problema específico são usadas para resolver essas equações. Além disso, alguns parâmetros *de controle* são usados para controlar a convergência, estabilidade e precisão do método numérico.

A equação da concentração é uma equação de difusão-convecção que surge em vários problemas físicos na engenharia, incluindo a migração de contaminantes num rio, espalhamento de fumaça na atmosfera, dispersão de produtos

químicos em reatores, dispersão de traçadores em um meio poroso. A equação de difusão-convecção também é utilizada na biologia, como por exemplo o modelo matemático que é desenvolvido para o perfil (distribuição) de cálcio. O modelo incorpora um importante parâmetro fisiológico, como o coeficiente de difusão [29].

1.1 Motivação

O mercúrio e seus compostos são amplamente distribuídos no meio ambiente e a principal causa de acumulação de metilmercúrio em seres humanos é o consumo de peixe. A taxa de acumulação de metilmercúrio depende de muitos fatores, como a quantidade, tamanho, tipo e frequência do peixe consumido. Por exemplo, o picão verde absorve mais metilmercúrio que a truta de arco íris [35], pois as maiores concentrações de sedimentos são previstas em ambientes de água doce [3]. Segundo a literatura [26], a produção mundial de mercúrio é estimada em 10 mil toneladas por ano, e seu uso ocorre nas mais diversas áreas, como indústrias, mineração e odontologia, sendo os principais produtores o Canadá, a Rússia e a Espanha. No Brasil o mercúrio metálico é usado em indústrias de cloro-soda, lâmpadas elétricas, pilhas, tintas, indústria farmacêutica, explosivos, couro, madeira, têxtil, em artigos dentários, aparelhos elétricos, catalisadores para materiais plásticos, garimpo e entre outros [5].

A preocupação com a proteção ambiental vem ganhando, cada vez mais, papel relevante no cenário mundial, principalmente nestas últimas décadas. Neste contexto, pretende-se modelar matematicamente e aproximadamente a concentração de poluentes no meio aquático. No campo da modelagem da qualidade da água, vários pesquisadores apresentaram diferentes abordagens para entender e interpretar o conceito básico de problemas de qualidade da água. Em caso de emergência, como descargas acidentais em um rio, a previsão da evolução do poluente é crucial para a tomada de decisões eficazes e rápidas. A tomada de decisões deve ser simples e

precisa, pois o modelo necessita de um tempo computacional que deve ser reduzido e de um mínimo de dados de entrada [36]. Enquanto a melhoria da água pode ser obtida somente com planos que reduzam as emissões de poluentes, a modelagem matemática da dispersão na água deve ser capaz de relacionar a causa (a fonte) com a concentração da poluição.

1.2 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver um modelo matemático bidimensional para descrever a concentração de poluentes na água, via uso de equações diferenciais parciais da dinâmica de fluidos. Discretiza-se as equações do modelo a partir do método de diferenças finitas centrais gerando sistemas de equações lineares. Obtém-se a solução dos sistemas utilizando o método de Gauss-Seidel.

Os objetivos específicos deste estudo, tendo em vista a modelagem do escoamento de poluente na água são:

1. Analisar a consistência e estabilidade da equação da concentração;
2. Obter a solução analítica da equação da concentração;
3. Comparar a solução numérica do modelo com a solução analítica da equação de concentração.

1.3 Organização do Trabalho

No capítulo 2 apresenta-se a revisão bibliográfica sobre o mercúrio, seu ciclo biogeoquímico, o transporte, e a transformação no ambiente aquático.

No capítulo 3 descreve-se as equações governantes do escoamento: as equações da conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e da

concentração.

No capítulo 4 discretiza-se as equações diferenciais do modelo por diferenças finitas, apresenta-se o método iterativo de Gauss Seidel. Além disso, faz-se a análise de consistência e estabilidade da equação da concentração.

No capítulo 5 apresenta-se a solução analítica da equação da concentração por transformada de Laplace, mostrando o resultado por isolinhas. De forma semelhante, apresenta-se a solução numérica do modelo e finalmente se compara as duas soluções.

No capítulo 6 tem-se a conclusão desta pesquisa e a indicação de futuros trabalhos.

2 MERCÚRIO

O mercúrio é um metal pesado de aspecto prateado, inodoro, cujo símbolo é Hg . As formas nas quais pode ser encontrado são: mercúrio metálico Hg^0 , mercúrio (I) e mercúrio (II), nas quais os átomos perdem um ou dois elétrons, respectivamente, formando o mercúrio mercurioso Hg_2^{++} e o mercúrio mercúrico Hg^{++} . Estes dois últimos, mercurioso e mercúrico, formam diversos compostos químicos orgânicos e inorgânicos, como indicado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Mercúrios orgânicos e inorgânicos [40]

Inorgânicos	
- Metálico	Hg^0
- Sais mercuriosos	Hg_2Cl_2
- Sais mercúricos	$HgCl_2$
Orgânicos	
- Compostos de alquilmercúrio	CH_3HgCl
- Compostos de arilmercúrio	C_6H_5HgCl
- Compostos de alcoxiarilmercúrio	CH_2OCH_2HgCl

Na Tabela 2.2 são apresentadas propriedades relevantes do mercúrio:

Tabela 2.2: Propriedades atômicas e físicas do mercúrio

Propriedade	
- Número atômico	80
- Massa atômica relativa	200,61
- Densidade relativa	13,6 (água = 1)
- Volume molar	$14,09cm^3$
- Velocidade do som	$1407ms^{-1}$
- Viscosidade dinâmica	1,55 Pa.s a $20^{\circ}C$
- Tensão superficial	484 dines/cm ($25^{\circ}C$)
- Meia vida	60 dias (no humano)

O mercúrio é um contaminante global porque pode sofrer transporte de longo alcance na atmosfera, ser persistente ao ambiente, acumula-se na cadeia

alimentícia e causa graves efeitos adversos sobre a saúde humana e dos ecossistemas [17]. A contaminação ambiental da terra, do ar, da água e da vida selvagem em vários ecossistemas com mercúrio em todo o mundo, devido à liberação natural e pela atividade humana, tem sido uma preocupação global por décadas. Em geral, a forma dominante de mercúrio na água, solo e sedimento é a forma inorgânica $Hg(II)$, enquanto o metilmercúrio CH_3Hg^+ é dominante na biota e na atmosfera [51].

Considera-se a existência de dois ciclos de transporte e distribuição do mercúrio no ambiente: um global e outro local. O ciclo de alcance global compreende a emissão natural de mercúrio pela gaseificação da crosta terrestre, por emissões vulcânicas e evaporação natural de corpos de água. O ciclo local é favorecido pelas fontes pontuais como, por exemplo, as indústrias que utilizam mercúrio. Os sedimentos de rios, lagos e do mar, poluídos com mercúrio são perigosos porque o mercúrio confinado pode permanecer ativo para a metilação por cerca de 100 anos, mesmo quando a fonte de poluição é eliminada.

2.1 Ciclo Biogeoquímico do Mercúrio

O conhecimento do ciclo do mercúrio no ambiente é de extrema importância para entender seu grau de toxicidade e a formação de seus compostos. No ciclo biogeoquímico, o mercúrio pode ser transformado entre mercúrio elementar Hg^0 , mercúrio divalente $Hg(II)$ e metilmercúrio CH_3Hg^+ , e dimetilmercúrio CH_3HgCH_3 . Todas estas espécies podem entrar em ambientes atmosféricos, aquáticos e terrestres.

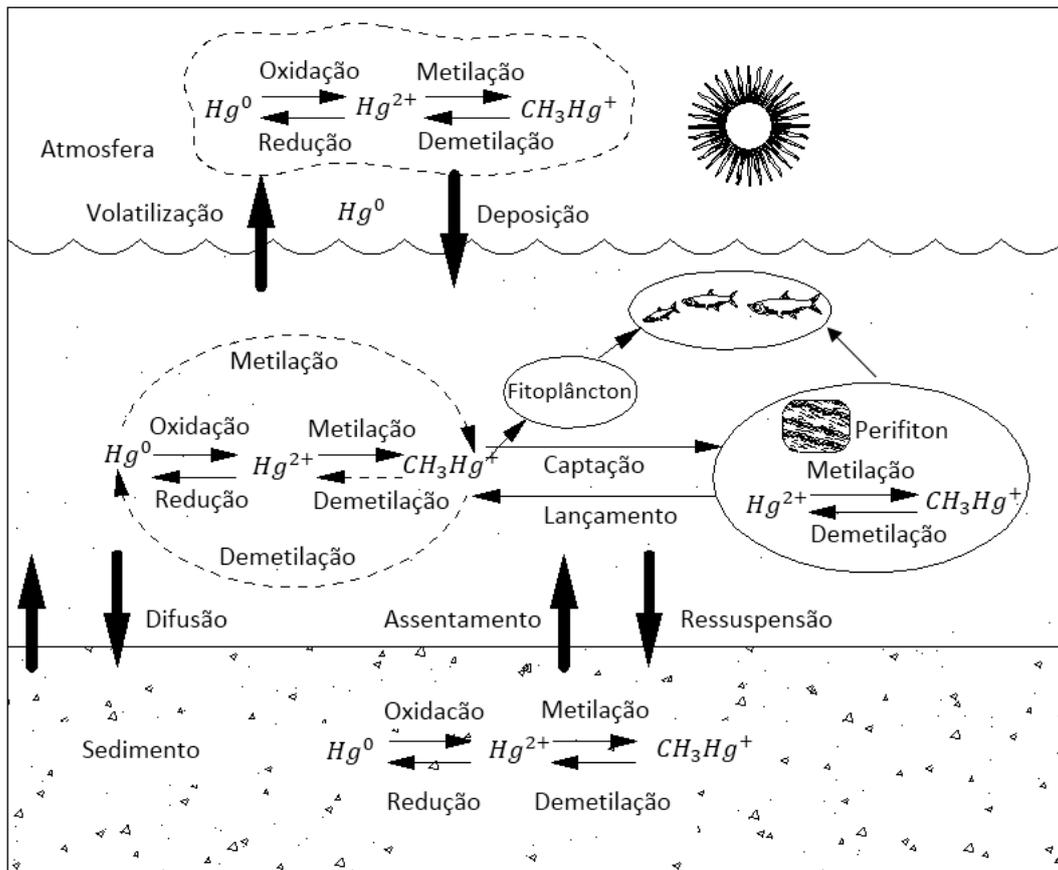


Figura 2.1: Ciclo do mercúrio no ambiente aquático [4].

A Figura 2.1 apresenta o ciclo do Hg na natureza, indicando as principais reações que podem ocorrer no sedimento ou solo, na água e na atmosfera. Nota-se grande influência das bactérias e da luz solar no ciclo do Hg . O ciclo biogeoquímico do mercúrio é inicialmente dominado pela propagação atmosférica e por trocas entre a atmosfera e a superfície dos continentes e oceanos. Em águas superficiais, o mercúrio inorgânico $Hg(I)$ pode ser reduzido ao mercúrio metálico Hg^0 e, em seguida, volatilizado para ser transferido para a atmosfera. Na atmosfera, o mercúrio gasoso vai sofrer reações de redução e de oxidação em ambas as fases gasosa e aquosa. Ele também pode permanecer em ambientes costeiros por deposição húmida ou seca.

2.2 Transporte e Transformação do Mercúrio no Ambiente Aquático

Uma vez introduzido em ambientes aquáticos, as diferentes formas de mercúrio podem mudar. Nos sedimentos, o mercúrio inorgânico pode ser convertido por vários mecanismos, e em seguida, ser transferido para a água. Ele pode bioacumular-se em teias alimentares aquáticas, o CH_3Hg^+ , e ainda pode biomagnificar-se [38].

Nos últimos anos, algumas descobertas importantes ocorreram: a descrição da formação do metilmercúrio encontrado a partir da metilação do Hg por bactérias aeróbias e anaeróbias merece maior destaque. A permanência do metilmercúrio nos peixes é relativamente maior porque ele é metabolizado lentamente [40]. A meia-vida do metilmercúrio em peixes ocorre em função da espécie, variando geralmente de um a três anos. As bactérias redutoras de sulfato (BRS) foram identificadas como os principais metiladores nos sedimentos aquáticos [11]. A biodisponibilidade do mercúrio para a metilação depende da especiação do mercúrio. Complexos de mercúrio neutro dissolvido, tais como HgS^0 em vez de Hg^{2+} livre, foram considerados mais susceptíveis de serem absorvidos por bactérias. A metilação do mercúrio também é influenciada por uma variedade de fatores ambientais como temperatura, pH, salinidade, matéria orgânica, concentrações de sulfeto e de sulfato [55].

É importante notar que as espécies de mercúrio inorgânico bivalentes ou íons mercúricos são necessários na metilação biológica. Frequentemente, contudo, os compostos de mercúrio lançados no ambiente não estão nesta forma. O mercúrio inorgânico pode ser metilado, principalmente, por dois mecanismos [40]:

- i) biológico, por microrganismos e fungos;

ii) químico ou abiótico, por meio de diferentes processos:

- pela reação com a metilcobalamina não enzimática; o mercúrio em solução aquosa pode ser metilado abioticamente. Em extratos livres de células de bactéria estritamente anaeróbica, *Methanobacterium omelianskii*, foi observada transferência não enzimática dos grupos metila da metilcobalamina para os íons Hg^{2+} . A metilação não enzimática dos íons Hg^{2+} demonstrada em laboratório não é comprovada em condições ambientais.
- via reação de transmetilação; o CH_3Hg^+ pode ser formado quimicamente através de uma reação de transmetilação, envolvendo derivados metílicos de estanho. Pode, também, ser produzido quimicamente no sedimento pela reação de transalquilação, entre mercúrio inorgânico e compostos etílicos e metílicos de chumbo lançados no mesmo corpo d'água.
- pela reação com os ácidos fúlvico e húmico; podem também doar grupos metila para o Hg^{2+} e, portanto, ser uma fonte adicional de CH_3Hg^+ no ecossistema.

A formação biológica enzimática do CH_3Hg^+ foi inicialmente descrita como ocorrendo em sedimento orgânico anaeróbico. Os estudos iniciais indicavam que o CH_3Hg^+ era formado a partir de Hg^{2+} por microrganismos anaeróbicos dependendo da disponibilidade da metilcobalamina. A metilcobalamina é capaz de transferir o grupo metila para o íon Hg^{2+} . Ela transfere o grupo metila para produzir o CH_3Hg^+ e o CH_3HgCH_3 em condições tanto aeróbicas quanto anaeróbicas. A metilcobalamina pode estar disponível em quantidades significativas no ambiente, porque é uma coenzima produzida pelas bactérias tanto aeróbicas quanto anaeróbicas. Contudo, estudos mais recentes demonstram que a metilação do mercúrio ocorre

principalmente como processo microbiano aeróbico. A taxa de metilação do sistema aeróbico aquoso é maior que a do correspondente sistema anaeróbico [2].

O mercúrio também pode ser metilado no intestino, no muco e limo dos peixes, no intestino de ratos e de humanos, mas não no estômago de gado. Certos microrganismos do solo também metilam o mercúrio. A taxa de síntese biológica do CH_3Hg^+ é determinada, principalmente, pela concentração e forma química de Hg disponível no ecossistema aquático, assim como pela composição das espécies microbianas e o tamanho e atividade da população natural capaz de metilar. Esta capacidade pode ser observada em muitas espécies de bactérias. Entre elas citam-se *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli*, *Clostridium hermoaceticum* e *Clostridium sticklandii*.

A seguir apresenta-se as equações governantes do escoamento e depois o modelo para o espalhamento do poluente mercúrio.

3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO ESCOAMENTO DE FLUIDOS

A obtenção destas equações é usualmente baseada num **princípio de conservação**, aplicado num volume de controle arbitrário $V \subset \mathbb{R}^d$, onde $d = 1, 2$, ou 3 é o número de dimensões do espaço considerado. Se o fluido está em movimento, ele pode fluir para dentro e para fora da **Superfície de Controle** S , a qual forma a fronteira de V . As moléculas individuais podem atravessar a interface, mesmo que o fluido esteja em repouso. Por conseguinte, as propriedades físicas e químicas do fluido em V são influenciadas pelo meio envolvente. Além disso, algumas quantidades são conservadas tais como [10], [41]:

- A Massa do fluido;
- A taxa de mudança de quantidade de movimento é igual à soma das forças na partícula de fluido (segunda lei de Newton);
- A taxa de variação de energia é igual à soma da taxa de aquecimento e a taxa de trabalho realizada sobre uma partícula fluida (primeira lei termodinâmica).

Os princípios de conservação podem ser expressos em termos de equações diferenciais que descrevem todo o mecanismo de transporte relevante, tais como convecção, difusão e dispersão.

Seja $\mathbf{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ o caminho seguido por uma partícula fluida, de modo que o campo de velocidade é dado por:

$$\mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)),$$

onde

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}(t), t) = \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt},$$

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= \frac{dx}{dt}, \\ \dot{y}(t) &= \frac{dy}{dt}, \\ \dot{z}(t) &= \frac{dz}{dt}.\end{aligned}$$

A aceleração de uma partícula no fluido é dada por:

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d^2}{dt^2}\mathbf{x}(t) = \frac{d}{dt}\mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t),$$

e pela regra da cadeia, isto torna-se:

$$\mathbf{a}(t) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Considere-se que:

$$\mathbf{u}(x, y, z, t) = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)),$$

obtem-se

$$\mathbf{a}(t) = u\mathbf{u}_x + v\mathbf{u}_y + w\mathbf{u}_z + \mathbf{u}_t,$$

e escrevendo

$$\mathbf{a}(t) = \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u},$$

onde

$$\partial_t \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t},$$

e

$$\mathbf{u} \cdot \nabla = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

Considerando uma função $\phi(x, y, z, t)$ depende da posição e tempo, defina-se:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \partial_t \phi + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi.$$

A taxa de mudança $\frac{D\phi}{Dt}$ é geralmente chamada de **derivada material** (também chamada a derivada substantiva, ou derivada de partícula) para enfatizar o fato de que a derivada é tomada seguindo um elemento fluido. Isto é feito em duas partes: primeiro $\partial_t\phi$ é a taxa local de mudança num dado ponto, sendo zero para fluxos estáveis. A segunda parte, $\mathbf{u} \cdot \nabla\phi$, é chamada a derivada advectiva, porque é a mudança em ϕ como resultado da advecção da partícula de um local para outro [49].

Na sequência, obtém-se as equações de conservação.

3.1 Conservação da Massa

Considere um volume infinitesimal de fluido fixo no espaço (descrição Euleriana). Deseja-se obter o fluxo de massa devido ao escoamento através de cada face de cada volume, alinhado ao sistema cartesiano.

O fluxo na direção x é:

$$\left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx\right) dydz - (\rho u) dydz = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx dy dz,$$

onde ρ é a massa específica.

O fluxo na direção y é:

$$\left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dy\right) dx dz - (\rho v) dx dz = \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dx dy dz.$$

O fluxo na direção z é:

$$\left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dz\right) dx dy - (\rho w) dx dy = \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dx dy dz.$$

O fluxo de massa no elemento de volume $dV = dx dy dz$ é:

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

e a taxa de variação da massa no volume infinitesimal é dada por:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} dx dy dz$$

e, pela lei de conservação de massa, a taxa de variação da massa no interior do volume de controle deve compensar o fluxo através da superfície de controle. Tem-se que a conservação é expressa pela seguinte relação:

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

ou na forma vetorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.1)$$

A última equação é a forma diferencial da lei de conservação da massa, também conhecida como **equação de continuidade** [14].

Um fluido é chamado de **incompressível** se sua densidade não muda com a temperatura e pressão. Os líquidos são quase incompressíveis. Embora os gases sejam compressíveis, para números de Mach $< 0,3$, a variação fracionária da pressão absoluta no fluido é pequena. A equação da continuidade (3.1) se reduz no caso incompressível a:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.2)$$

3.2 Conservação da Quantidade de Movimento

A equação de quantidade de movimento é a representação matemática da segunda lei de Newton, que afirma que um pequeno elemento de volume que se move com o fluido é acelerado pelas forças que agem sobre ele:

$$\vec{F} = m \vec{a},$$

onde m é a massa e \vec{a} é a aceleração.

A forma mais geral da segunda lei de Newton pode ser vista como uma equação de conservação da quantidade de movimento. A força resultante é igual à

taxa de variação da quantidade de movimento. Para aplicar a lei de conservação de movimento vamos considerar um elemento infinitesimal que se desloca com o escoamento e analisar as componentes que agem sobre esse elemento em cada direção [14],[6]. Dentro os tipos de força distinguem-se:

- Forças de Corpo (ou Campo): São as forças que agem diretamente sobre a massa ou o volume do fluido. Exemplos: gravidade, forças centrífugas e de Coriolis, forças eletromagnéticas, etc.
- Forças de Superfície: São forças que agem diretamente no elemento de fluido através da superfície de controle. Exemplos: tensões normais e de cisalhamento, tensão superficial, etc.

A força resultante na direção x é dada por:

$$F_x = \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dydz + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy + \rho f_x dx dy dz,$$

ou seja

$$F_x = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dx dy dz + \rho f_x dx dy dz.$$

A massa do elemento do fluido é dada por $\rho dx dy dz$. Logo, a aplicação da segunda lei de Newton na direção x , para um volume de fluido em movimento com o escoamento, é dada por:

$$\rho dx dy dz \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dx dy dz + \rho f_x dx dy dz.$$

Simplificando, resulta:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] + \rho f_x.$$

De maneira semelhante, obtém-se as equações para as direções y e z .

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] + \rho f_y.$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho f_z.$$

Substituindo a relação para a **derivada material**, obtém-se as expressões equivalentes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} \right] &= \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] + \rho f_x \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} \right] &= \left[-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] + \rho f_y \\ \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w w)}{\partial z} \right] &= \left[-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho f_z \end{aligned} \quad (3.3)$$

As tensões no fluido são modeladas utilizando os resultados de Newton, de que a tensão de cisalhamento é linearmente proporcional ao gradiente de velocidade, sendo a constante de proporcionalidade a viscosidade.

Estendendo isto para um volume infinitesimal (Stokes) resultam as relações:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\ \tau_{yy} &= \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \\ \tau_{zz} &= \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Na equação (3.4) o coeficiente μ é a viscosidade dinâmica do fluido, o coeficiente λ é o chamado segundo coeficiente de viscosidade e está relacionado ao

trabalho irreversível pela compressão. Pela hipótese de Stokes tem-se $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ [14], que é frequentemente utilizada, mas que ainda não foi definitivamente confirmada até hoje.

Substituindo as equações (3.4) em (3.3), obtém-se as equações de Navier-Stokes na forma conservativa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) + \rho f_x. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right) + \rho f_y. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w w)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \rho f_z. \end{aligned}$$

3.3 Conservação da Energia

A equação de energia pode ser expressa pela primeira lei da termodinâmica:

$$\Delta E = Q + W,$$

onde ΔE é a taxa de variação da energia, Q é fluxo de calor e W é o trabalho realizado pelas forças (de corpo e de superfície).

Apartir da equação da quantidade de movimento obtém-se o trabalho por unidade

de volume:

$$\begin{aligned}
W = & - \left(\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\
& + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right) \\
& + \rho(uf_x + vf_y + wf_z).
\end{aligned}$$

O fluxo de calor, por unidade de volume, no elemento é dado por uma parcela associada ao volume e outra devido à condução através da superfície de controle [18]:

$$Q = \rho\dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right).$$

A energia total do sistema para um volume infinitesimal, pode ser dividida em duas partes: a energia interna relacionada à cinética molecular (termodinâmica) do fluido e a energia cinética (macroscópica) devido ao escoamento. A energia por unidade de volume é dada por:

$$\Delta E = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{v^2}{2} \right),$$

logo, a equação de energia resulta em:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) = & \rho\dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\
& - \left(\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\
& + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right) \\
& + \rho(uf_x + vf_y + wf_z).
\end{aligned}$$

3.4 Conservação da Espécie Química

A transferência de massa é a base para muitos processos químicos e biológicos, como a remoção de dióxido de enxofre (SO_2) do gás de combustão, um processo químico, ou o projeto de um rim artificial, um processo biológico.

As leis de transferência de massa mostram a relação entre o fluxo da substância difusora e o gradiente de concentração responsável pela transferência de massa. A difusão ocorre apenas em misturas, e sua avaliação deve envolver o exame do efeito de cada componente. Por exemplo, muitas vezes desejamos conhecer a taxa de difusão de um componente específico em relação à velocidade da mistura. Como cada componente pode possuir uma mobilidade diferente, a velocidade da mistura é às vezes aproximada pela média das velocidades de todos os componentes presentes. Quando um sistema de fase única contém duas ou mais espécies cujas concentrações não são uniformes, massa é transferida para minimizar as diferenças de concentração no sistema.

A transferência de massa entre um fluido em movimento e uma superfície, ou entre fluidos em movimento imiscíveis separados por uma interface móvel é muitas vezes auxiliada pelas características dinâmicas do fluido em movimento. Este modo de transferência é chamado de transferência de massa convectiva, com a transferência sempre indo da concentração mais alta para uma menor da espécie que está sendo transferida. A transferência convectiva depende tanto das propriedades de transporte como das características dinâmicas do fluido que flui [54].

Uma mistura consiste em duas ou mais espécies químicas e a quantidade de qualquer espécie i pode ser quantificada em termos de sua densidade de massa $\rho_i(kg/m^3)$, ou de sua concentração molar $C_i(Kmol/m^3)$. A densidade de massa e a concentração molar estão relacionadas com o peso molecular da espécie, M_i [27]:

$$\rho_i = M_i C_i,$$

onde ρ_i representa a massa da espécie i por unidade de volume da mistura, e a densidade da mistura é

$$\rho = \sum_i \rho_i.$$

De forma semelhante, a concentração molar por unidade de volume da mistura é

$$C = \sum_i C_i.$$

A quantidade de espécies i na mistura pode também ser quantificada em termos da sua fração molar

$$x_i = \frac{C_i}{C},$$

de formas que

$$\sum_i x_i = 1.$$

A velocidade média molar para uma mistura multicomponente é definida em termos das concentrações molares de todos os componentes por

$$\mathbf{V} = \frac{\sum_i C_i \mathbf{v}_i}{\sum_i C_i} = \frac{\sum_i C_i \mathbf{v}_i}{C}. \quad (3.5)$$

A velocidade de uma espécie particular em relação à velocidade média molar é denominada velocidade de difusão. Podemos definir a velocidade de difusão, $\mathbf{v}_i - \mathbf{V}$, como a velocidade da espécie i em relação à velocidade média molar. De acordo com a lei de Fick, uma espécie pode ter velocidade relativa à velocidade média molar somente se houver gradientes na concentração. A relação básica para a difusão molecular define o fluxo molar em relação à velocidade média molar, \mathbf{J}_A . Uma relação empírica para o fluxo molar, pela primeira lei de Fick, define a difusão do componente A em um sistema isotérmico e isobárico como:

$$\mathbf{J}_A = -D_{AB} \nabla C_A, \quad (3.6)$$

onde D_{AB} , de acordo com uma equação de Arrhenius, é escrito na forma,

$$D_{AB} = D_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right),$$

que é o coeficiente de difusão da espécie difusora A para B , D_0 é uma constante de proporcionalidade de unidades consistentes com D_{AB} , E_a é a energia de ativação (J/mol), R é a constante dos gases perfeitos ($8,314J/mol \cdot K$), e T é a temperatura absoluta (K).

Para um sistema binário com velocidade média constante, o fluxo molar em relação à velocidade média molar também pode ser expresso por:

$$\mathbf{J}_A = C_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{V}). \quad (3.7)$$

Desta forma, obtém-se

$$\mathbf{J}_A = C_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{V}) = -D_{AB}\nabla C_A$$

e

$$C_A\mathbf{v}_A = C_A\mathbf{V} - D_{AB}\nabla C_A, \quad (3.8)$$

onde \mathbf{V} pode ser avaliado pela equação (3.5) como

$$C_A\mathbf{V} = x_A(C_A\mathbf{v}_A + C_B\mathbf{v}_B).$$

Substituindo esta expressão na equação (3.8), obtém-se

$$C_A\mathbf{v}_A = x_A(C_A\mathbf{v}_A + C_B\mathbf{v}_B) - D_{AB}\nabla C_A \quad (3.9)$$

e escrevendo

$$N_A = C_A\mathbf{v}_A, \quad (3.10)$$

$$N_B = C_B\mathbf{v}_B, \quad (3.11)$$

e substituindo as equações (3.10) e (3.11) na equação (3.9), obtém-se uma relação para o fluxo do componente A

$$N_A = x_A(N_A + N_B) - D_{AB}\nabla C_A. \quad (3.12)$$

Note que o fluxo molar, N_A , é resultante das duas quantidades vetoriais: $-D_{AB}\nabla C_A$ o fluxo molar, J_A , resultante do gradiente de concentração, é referido como a contribuição do gradiente de concentração; e $x_A(N_A + N_B) = C_A\mathbf{V}$, o fluxo molar resultante do componente A transportado no fluxo em massa do fluido.

A equação da continuidade para a mistura é idêntica à equação da continuidade (3.1) para um fluido homogêneo [54]. Se R_A representa a taxa de produção molar de A por unidade de volume e R_B representa a taxa de produção molar de B por unidade de volume, as equações de equivalentes molares são:

para a componente A

$$\nabla \cdot N_A + \frac{\partial C_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (3.13)$$

para a componente B

$$\nabla \cdot N_B + \frac{\partial C_B}{\partial t} - R_B = 0$$

e para a mistura

$$\nabla \cdot (N_A + N_B) + \frac{\partial (C_A + C_B)}{\partial t} - (R_A + R_B) = 0.$$

Para a mistura binária de A e B , resulta

$$N_A + N_B = C_A v_A + C_B v_B = C\mathbf{V}.$$

Em geral, a equação de continuidade para a mistura em unidades molares é:

$$\nabla \cdot (C\mathbf{V}) + \frac{\partial C}{\partial t} - (R_A + R_B) = 0.$$

Pela expressão (3.12) ou seu equivalente, tem-se:

$$N_A = x_A C\mathbf{V} - CD_{AB}\nabla x_A. \quad (3.14)$$

Logo, substituindo a equação (3.14) na equação (3.13), obtém-se

$$-\nabla \cdot (CD_{AB}\nabla x_A) + \nabla \cdot C_A\mathbf{V} + \frac{\partial C_A}{\partial t} - R_A = 0.$$

O coeficiente de difusão, D_{AB} , é frequentemente assumido como constante. Dividindo cada termo pelo peso molecular de A e rearranjando, obtém-se.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}C_A) = D_{AB}\nabla^2 C_A + R_A,$$

que para qualquer espécie i é dada por:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}C_i) = D\nabla^2 C_i + R_i. \quad (3.15)$$

4 PROCEDIMENTO DA SOLUÇÃO

Neste capítulo, define-se o modelo matemático com as equações de continuidade, quantidade de movimento e concentração da espécie. As EDPs são adimensionalizadas e são aproximadas pelo método de diferenças finitas. Usa-se o método iterativo de Gauss Seidel para resolução de sistemas de equações lineares resultante e acelera-se a convergência usando o método de sobre-relaxações sucessivas. Para a solução numérica é importante a análise de consistência e estabilidade para garantir que a aproximação é adequada.

4.1 Definição do Modelo Matemático

Na modelagem temos a entrada de um fluido (água) por um canal retangular bidimensional, e a entrada de um poluente (mercúrio, Hg^0) por um canal no eixo x , como mostra o Figura 4.1. Considera-se o problema do escoamento de fluido Newtoniano, sendo o problema descrito através das equações da continuidade, quantidade de movimento, Poisson para a pressão (obtida a partir das equações de continuidade e quantidade de movimento) e da espécie química [10],[13]. O modelo do problema físico é obtida a partir das seguintes considerações:

- i) Fluido newtoniano e incompressível;
- ii) Escoamento bidimensional;
- iii) Escoamento laminar;
- iv) Escoamento permanente (mantém-se t apenas como parâmetro de controle numérico).

As equações seguintes são descritas para um domínio $0 < x^* < X^*$ e $0 < y^* < Y^*$ e com bases nas hipóteses (i),(ii) e (iii) tem-se:

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0 \quad (4.1)$$

- Equações da quantidade do movimento nas direções x e y :

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \nu \left[\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \right] \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \nu \left[\frac{\partial^2 v^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial y^{*2}} \right] \quad (4.3)$$

onde u^* é a componente da velocidade longitudinal, v^* é a velocidade transversal, ν a viscosidade, ρ a massa específica, e p^* a pressão.

- Equação da espécie química [30],[52].

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial C^*}{\partial x^*} = k_x \frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}} + k_y \frac{\partial^2 C^*}{\partial y^{*2}} + S^*(x^*, y^*, t^*) \quad (4.4)$$

onde C^* é a concentração de poluente (mercúrio) na água em qualquer local (x^*, y^*) e tempo t^* ; k_x e k_y , são os coeficientes de difusividade nas direções x^* e y^* , respectivamente; u^* é a velocidade média da água; e $S^*(x^*, y^*, t^*)$ o termo fonte, que representa a produção ou destruição do poluente (a sua transformação).

4.2 Adimensionalização das Equações

As dimensões e as constantes físicas adimensionais têm sido amplamente utilizadas, em termodinâmica, ótica, radiação e outras esferas da física, especialmente em aplicações em vários ramos científicos e técnicos naturais. Em matemática, as quantidades adimensionais têm sua base teórica na teoria dos grupos e também na álgebra linear e no cálculo da matriz. Ao mesmo tempo, o teorema fundamental para determinar os critérios de similaridade é a homogeneidade dimensional das equações da física matemática são conforme definido por Fourier. Os critérios de

similaridade são importantes em matemática numérica e modelagem computacional, e não apenas em expressões generalizadas de estabilidade da solução numérica das equações da física matemática, mas também em outras esferas da matemática. Em matemática, por exemplo, diversos números adimensionais expressam condições de estabilidade da solução numérica, tais como os números de Courant, Neumann e Péclet e outros números adimensionais [32].

Os números que surgem da adimensionalização das equações do escoamento são:

- **Número de Reynolds (Re):** Proporção entre as forças de inércia e as forças viscosas, definido como [31],[39]:

$$Re = \frac{\rho V L}{\mu}.$$

Como $\nu = \frac{\mu}{\rho}$, o número de Reynolds pode também ser expresso como:

$$Re = \frac{V L}{\nu}.$$

onde ρ é a densidade do fluido, V velocidade do fluido, L o comprimento característica do domínio, μ a viscosidade dinâmica e ν a viscosidade cinemática do fluido. O significado principal do número de Reynolds é que o mesmo permite avaliar o tipo do escoamento e pode indicar se o escoamento é de forma laminar ou turbulenta. Costuma-se caracterizar um fluido com escoamento laminar num duto para $Re < 2000$ e escoamento turbulento com $Re > 4000$ [32].

- **Número de Péclet (Pe):** Razão entre o transporte convectivo e transporte molecular (massa ou energia), definido como:

$$Pe = \frac{\text{taxa de transporte advectiva}}{\text{taxa de transporte difusivo}},$$

ou

$$Pe = \frac{LV}{k},$$

onde L é o comprimento característico, V a velocidade de fluxo local, e k o coeficiente de difusão em massa. Se $Pe \ll 1$ significa que o termo de advecção é significativamente menor do que o termo de difusão. Fisicamente, a difusão domina e a advecção é insignificante, e se $Pe \gg 1$, o termo advecção é significativamente maior do que o termo de difusão. Neste caso, a advecção domina e a difusão é insignificante, e o espalhamento é quase inexistente.

As variáveis adimensionais adotadas nas equações (4.1), (4.2), e (4.3) são:

$$x = \frac{x^*}{L}, y = \frac{y^*}{L}, u = \frac{u^*}{V}, v = \frac{v^*}{V}, t = \frac{t^*V}{L}, C = \frac{C^*}{C_\infty}, S = \frac{S^*L}{VC_\infty},$$

onde C_∞ é a concentração na corrente livre do fluido, logo as equações adimensionalizadas são expressadas como [18],[10]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] \quad (4.7)$$

Derivando a equação (4.6) com respeito a x , e a equação (4.7) com respeito a y , obtém-se:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = - \left(\frac{\partial^2 (uu)}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 (uv)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 (vv)}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \nabla \cdot V - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot V \quad (4.8)$$

Logo, substituindo a equação de continuidade (4.5), $\nabla \cdot V = 0$, na equação (4.8), obtém-se a equação de Poisson para a pressão: que após simplificações reduz-se a:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

e, finalmente, a equação (4.4) torna-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S, \quad (4.10)$$

4.2.1 Condições Iniciais e Condições de Contorno

Considere que u indica uma variável dependente em um problema de valor de contorno. Uma condição que prescreve os valores de u em si ao longo de uma parte do contorno é conhecida como **condição de Dirichlet**. A **condição de Neumann** prescreve os valores das derivadas normais $\frac{du}{dn}$ em uma parte do contorno. Outra condição de contorno é a **condição de Robin**. Ela prescreve valores de $uh + \frac{du}{dn}$ nos contornos, onde h é uma constante ou função das variáveis independentes [7].

As condições iniciais e de contorno para as equações da quantidade de movimento, pressão e da espécie química no modelo, para $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq y \leq \frac{1}{10}$ são dadas por:

Condições Iniciais: para o tempo $t = 0$.

$$C(x, y, 0) = 0 \quad (4.11)$$

$$u(x, y, 0) = 1 \quad (4.12)$$

$$v(x, y, 0) = 0 \quad (4.13)$$

$$p(x, y, 0) = 1 \quad (4.14)$$

As condições de contorno utilizados no modelo são as condições de Dirichlet e Neumann, e são escritas conforme segue:

Condição de Contorno: para o tempo $t > 0$

- para $x = 0$ e $0 < y < \frac{1}{10}$

$$C(0, y, t) = 0$$

$$u(0, y, t) = 1$$

$$v(0, y, t) = 0$$

$$\frac{\partial p(0, y, t)}{\partial x} = 0$$

- para $x = 1$ e $0 < y < \frac{1}{10}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial C(1, y, t)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial u(1, y, t)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial v(1, y, t)}{\partial x} &= 0 \\ p(1, y, t) &= 1\end{aligned}$$

- para $y = 0$ e $0 < x < 1$

$$C(x, 0, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x < 0,25; \\ 1 & \text{se } 0,25 \leq x < 0,3; \\ 0 & \text{se } 0,3 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

$$v(x, 0, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x < 0,25; \\ 0,5 & \text{se } 0,25 \leq x < 0,3; \\ 0 & \text{se } 0,3 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

$$u(x, 0, t) = 0$$

$$\frac{\partial p(x, 0, t)}{\partial y} = 0$$

- para $y = \frac{1}{10}$ e $0 < x < 1$

$$C(x, \frac{1}{10}, t) = 0$$

$$u(x, \frac{1}{10}, t) = 0$$

$$v(x, \frac{1}{10}, t) = 0$$

$$\frac{\partial p(x, \frac{1}{10}, t)}{\partial y} = 0$$

Na Figura 4.1 apresenta-se as condições de contorno do modelo.

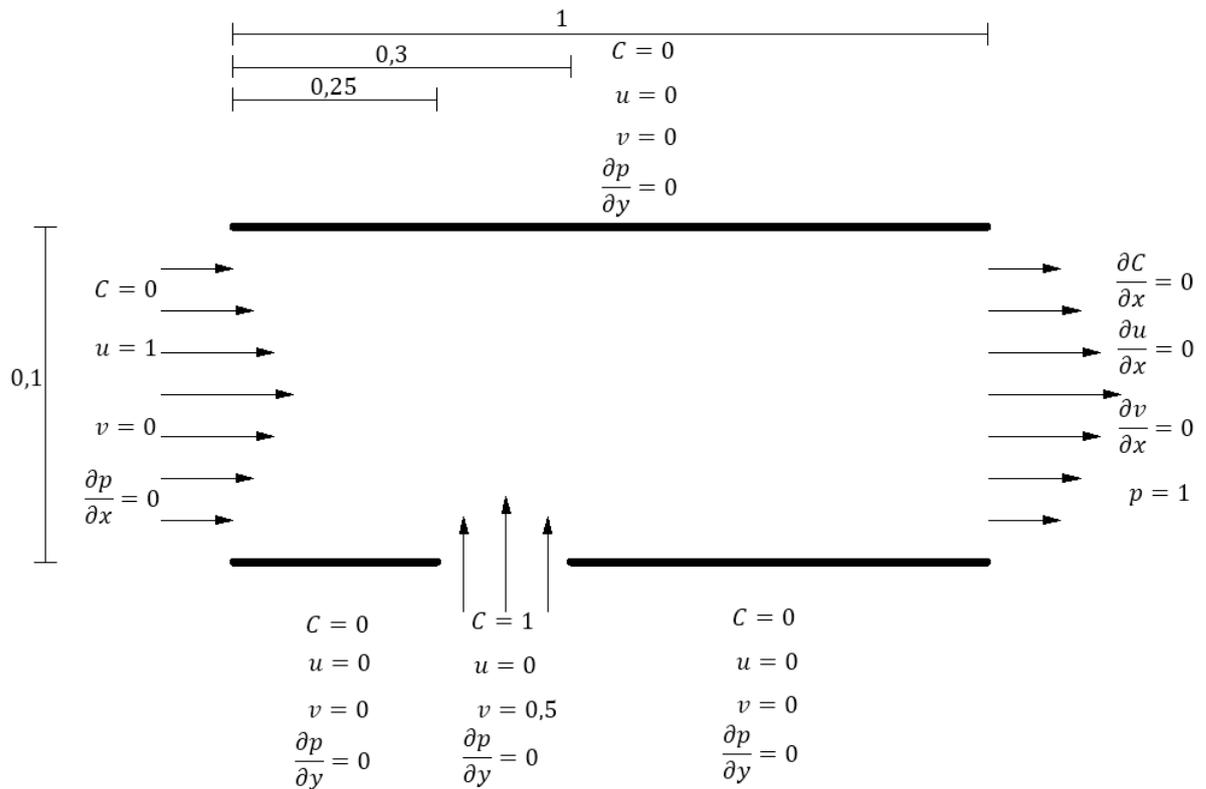


Figura 4.1: Condições de contorno do modelo

4.3 Diferenças Finitas

Um dos métodos usados para discretizar equações diferenciais para solução computacional é o método de diferenças finitas. A expansão em séries de Taylor de funções de várias variáveis independentes, resulta em diferenças progressivas, regressivas e centrais [42],[19],[12].

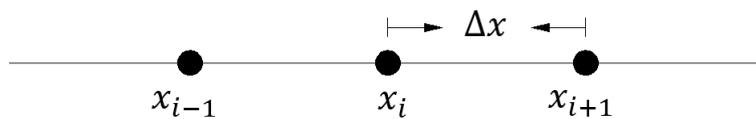


Figura 4.2: Diferenças finitas unidimensional

Pode-se deduzir uma aproximação de diferença progressiva utilizando a série de Taylor. As diferenças finitas progressivas utilizam um ponto a frente de x_i , o ponto $x_i + \Delta x$, onde $\Delta x = x_{i+1} - x_i$. A expansão em série de Taylor do valor de f em $x = x_i + \Delta x$ em torno do valor de f em $x = x_i$ é:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} + \dots \quad (4.15)$$

que pode ser reescrita como:

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} - \dots$$

Para Δx pequeno pode-se truncar a série,

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} + O(\Delta x),$$

onde $O(\Delta x)$ significa a combinação de termos da ordem de Δx ou menor. Para diferenças regressivas por expansão em séries de Taylor de f em $x = x_i - \Delta x$ em torno do valor de f em $x = x_i$ resulta:

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} + \dots \quad (4.16)$$

Isto pode ser reescrito como:

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} - \dots$$

Para Δx pequeno pode-se truncar a série, de formas que:

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x).$$

Obtém-se por subtração das equações (4.15) e (4.16) para $\frac{df(x_i)}{dx}$ o seguinte resultado

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

que é dita ser a diferença central com precisão de segunda ordem [16], [39].

Uma interpretação geométrica dos três esquemas de diferenças é mostrada na Figura 4.3. Vê-se que a aproximação por diferença central fornece uma melhor representação da inclinação da curva no ponto de interesse, que é a primeira derivada.

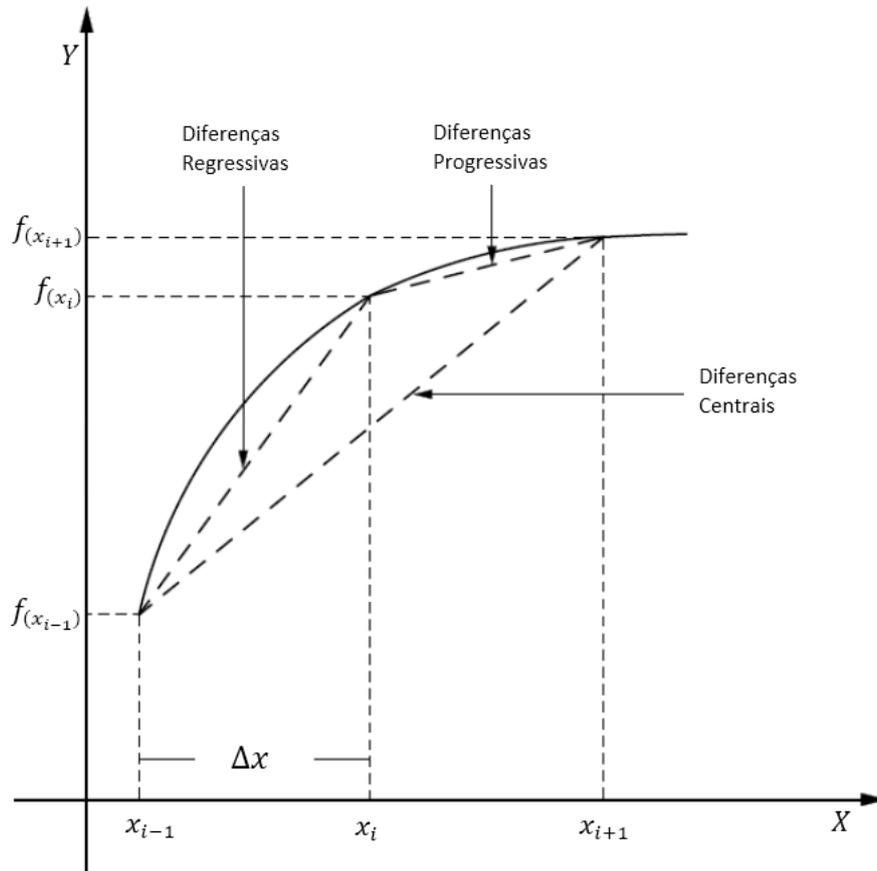


Figura 4.3: Interpretação geométrica de diferenças finitas

De forma semelhante, para a aproximação da derivada de ordem 2 das equações (4.15) e (4.16) tem-se:

$$\frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} = \frac{f(x_i + \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

Na resolução de equações diferenciais parciais, analisa-se funções de duas ou mais variáveis, como por exemplo $f(x, y)$, $f(x, y, t)$. O método numérico

aplicado para o caso bidimensional é o método de diferenças finitas centrais, que é aproximado de forma semelhante ao caso unidimensional. Os subíndices (i, j) são usadas para indicar (x_i, y_j) , como mostrado na Figura 4.4; os espaçamentos da malha nas direções i e j são Δx e Δy , respectivamente. Os pontos espaciais (i, j) significam que $x_i = x_0 + i\Delta x, y_j = y_0 + j\Delta y$ [20].

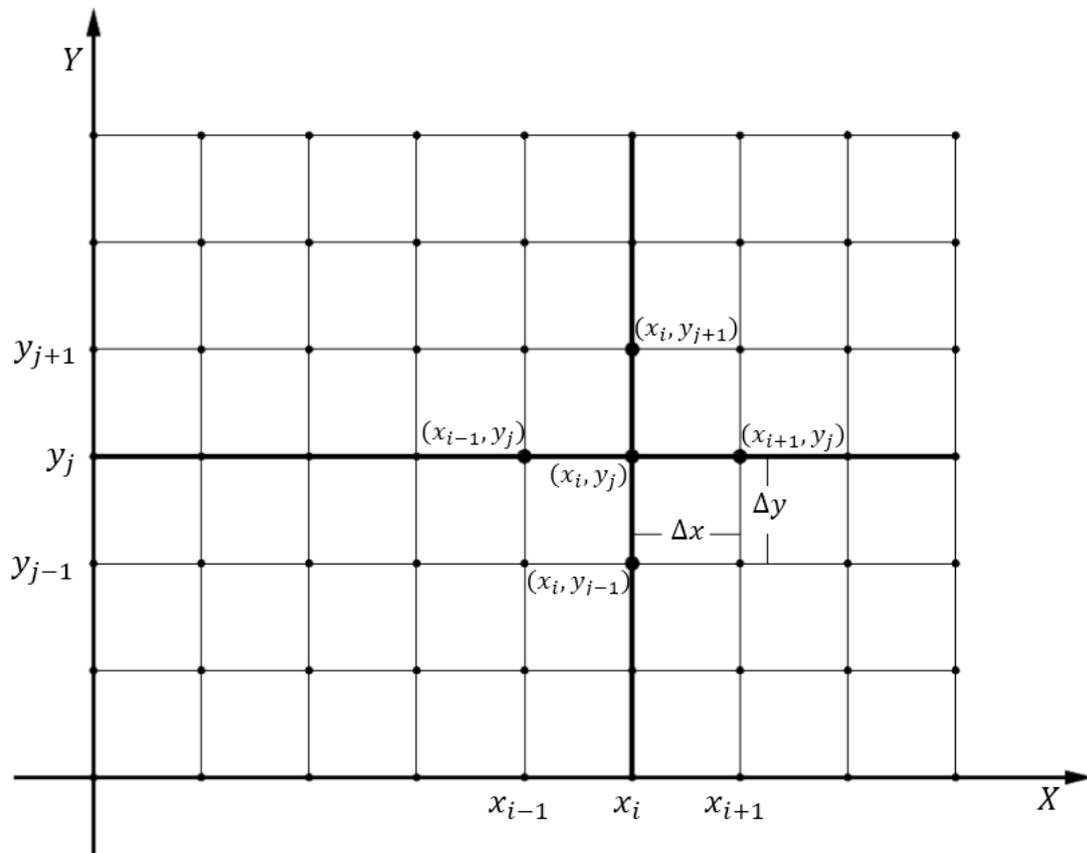


Figura 4.4: Diferenças finitas (bidimensional)

Desta forma, obtém-se

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x_i, y_j)} &= \frac{f(x_{i+1}, y_j) - f(x_{i-1}, y_j)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \\ \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(x_i, y_j)} &= \frac{f(x_i, y_{j+1}) - f(x_i, y_{j-1})}{2\Delta y} + O(\Delta y^2) \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{(x_i, y_j)} = \frac{f(x_{i+1}, y_j) - 2f(x_i, y_j) + f(x_{i-1}, y_j)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{(x_i, y_j)} = \frac{f(x_i, y_{j+1}) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i, y_{j-1})}{(\Delta y)^2} + O(\Delta y^2)$$

onde $\Delta x = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}$ e $\Delta y = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2}$.

Aproximando a derivativa em relação ao tempo por séries de Taylor para duas variáveis em torno de (x_i, t_n) tem-se:

$$f(x_i, t_n + \Delta t) = f(x_i, t_n) + \Delta t \frac{\partial f(x_i, t_n)}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 f(x_i, t_n)}{\partial t^2} + \dots,$$

que resulta em

$$\frac{\partial f(x_i, t_n)}{\partial t} = \frac{f(x_i, t_n + \Delta t) - f(x_i, t_n)}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (4.17)$$

A equação (4.17) pode ser expressa como:

$$\frac{\partial f(x_i, t_n)}{\partial t} \simeq \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t}.$$

4.4 Método Iterativo de Gauss Seidel

O método iterativo de Gauss Seidel é obtido pela resolução da equação em $A\mathbf{x} = b$. A matriz A é expressa como a soma de outras três, na forma:

$$A = L + U + D,$$

onde D denota a diagonal principal de A , L denota a parte triangular inferior de A (valores abaixo da diagonal principal) e U indica a parte triangular superior (valores acima da diagonal principal). Então,

$$(L + U + D)\mathbf{x} = b, \quad (4.18)$$

que pode ser escrita como:

$$(L + D) \mathbf{x}_{k+1} = -U\mathbf{x}_k + b \quad (4.19)$$

O uso de valores recém-determinadas de \mathbf{x}_{k+1} é acomodado, incluindo a parte triangular inferior de A no lado esquerdo. Reorganizando a equação resulta para o método iterativo de Gauss-Seidel [9]:

$$\mathbf{x}_{k+1} = D^{-1}(-U\mathbf{x}_k - L\mathbf{x}_{k+1} + b), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.20)$$

sendo \mathbf{x}_0 o vetor inicial.

4.4.1 Convergência do Método Iterativo de Gauss Seidel

Definição 4.1. *A matriz $A_{n \times n} = (a_{ij})$ é estritamente diagonal dominante se, para cada $1 \leq i \leq n$, $|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$. Em outras palavras, cada valor na diagonal principal domina sua linha no sentido de que ele é maior em magnitude do que a soma das magnitudes do restante dos valores em sua linha.*

Considere que a equação (4.19) pode ser expressa como:

$$\mathbf{x}_{k+1} = -(L + D)^{-1} U\mathbf{x}_k + (L + D)^{-1} b. \quad (4.21)$$

Então, fica claro que a convergência do método de Gauss-Seidel é observada se o raio espectral da matriz é conforme segue:

Definição 4.2. *O raio espectral $\rho(A)$ de uma matriz quadrada A é a magnitude máxima dos seus autovalores.*

Teorema 4.1. *Se a matriz A $n \times n$ tem raio espectral $\rho(A) < 1$, e b é arbitrário, então, para qualquer vetor x_0 , a iteração $x_{k+1} = Ax_k + b$ converge. De fato, existe um único x^* tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$.*

Teorema 4.2. *Se A é uma matriz $n \times n$ estritamente diagonal dominante, então (i) A é uma matriz não singular e (ii) para cada vetor b e cada vetor inicial x_0 , o Método de Gauss-Seidel aplicado a $Ax = b$ converge para uma solução [42].*

Demonstração. Seja λ é um autovalor de $(L + D)^{-1}U$ da equação (4.21), com o autovetor correspondente v . Escolha um vetor próprio para que $v_m = 1$ e todos os outros componentes sejam menores em magnitude. Observe que os valores de L são os a_{ij} para $i > j$, e os valores de U são o a_{ij} para $i < j$. Em seguida, note que a linha m da equação do autovalor de $(L + D)^{-1}U$ é

$$\lambda(D + L)v = Uv.$$

Produz-se uma série de desigualdades, conforme

$$\begin{aligned} |\lambda| \left(\sum_{i>m} |a_{mm}| \right) &< |\lambda| \left(|a_{mi}| - \sum_{i<m} |a_{mi}| \right) \leq |\lambda| \left(|a_{mm}| - \left| \sum_{i<m} a_{mi}v_i \right| \right) \\ &\leq |\lambda| \left| |a_{mm}| + \sum_{i<m} a_{mi}v_i \right| = \left| \sum_{i>m} a_{mi}v_i \right| \leq \sum_{i>m} |a_{mi}|. \end{aligned}$$

Segue que $|\lambda| < 1$. O teorema 4.1, implica que o método de Gauss Seidel converge para uma solução de $Ax = b$. Finalmente, como $Ax = b$ tem uma solução para b arbitrário, A é uma matriz não singular. \square

4.4.2 Relaxação para Resolver Sistemas Lineares

A técnica de relaxações sucessivas e suas variantes estão entre os métodos iterativos mais populares e simples utilizados para a resolução de sistemas lineares grandes em muitas áreas da ciência e de engenharia. As técnicas de relaxação são usadas para acelerar a convergência de sistemas que são convergentes pelo método de Gauss-Seidel. A técnica de relaxações sucessivas é particularmente útil para resolver sistemas lineares que ocorrem na solução numérica de várias equações diferenciais parciais.

Na equação (4.18), após a multiplicação por ω e rearranjando, resulta

$$\begin{aligned}(\omega L + \omega U + \omega D) \mathbf{x} &= \omega b \\(\omega L + D) \mathbf{x} &= \omega b - \omega U \mathbf{x} + (1 - \omega) D \mathbf{x} \\ \mathbf{x} &= (\omega L + D)^{-1} ((1 - \omega) D \mathbf{x} - \omega U \mathbf{x}) + \omega (\omega L + D)^{-1} b.\end{aligned}$$

Logo, para um vetor inicial x_0 , tem-se a técnica de relaxação para o método de Gauss Seidel iterativo.

$$\mathbf{x}_{k+1} = (\omega L + D)^{-1} ((1 - \omega) D \mathbf{x}_k - \omega U \mathbf{x}_k) + \omega (\omega L + D)^{-1} b. \quad (4.22)$$

Para $k = 0, 1, 2 \dots$, se $0 < \omega < 1$ o método é dito ser de sub-relaxação, com $\omega = 1$ é exatamente o método de Gauss-Seidel e se $\omega > 1$ é dito ser de sobre-relaxação. Os métodos são abreviados por **SOR**, para o método de sobre-relaxações sucessivas [42], [21], [9]. A equação (4.22) pode ser expressada como:

$$\mathbf{x}_{k+1} = T_\omega \mathbf{x}_k + c_\omega \quad (4.23)$$

onde $T_\omega = (\omega L + D)^{-1} ((1 - \omega) D - \omega U)$ e $c_\omega = \omega (\omega L + D)^{-1} b$.

Teorema 4.3. *Se um $a_{ii} \neq 0$, para cada $i = 1, 2, \dots, N$, então $\rho(T_\omega) \geq |\omega - 1|$. Isso implica que o método SOR pode convergir somente se $0 < \omega < 2$.*

Demonstração. Na equação (4.23) temos que $T_\omega = (\omega L + D)^{-1} ((1 - \omega) D - \omega U)$. Rearranjando, tem-se $T_\omega = (\omega L D^{-1} + I)^{-1} ((1 - \omega) I - \omega D^{-1} U)$, onde I , $L D^{-1}$, e $D^{-1} U$, são a matriz identidade, triangular inferior e superior, respectivamente. Como o determinante de uma matriz triangular é igual ao produto de seus elementos diagonais, tem-se:

$$\det(T_\omega) = \det((\omega L D^{-1} + I)^{-1} ((1 - \omega) I - \omega D^{-1} U)) = (1 - \omega)^n.$$

Também tem-se $\det(T_\omega) = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n$, onde λ_i são autovalores de T_ω e, por consequência, $\rho(T_\omega) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i| \geq |1 - \omega|$. E assim, a fim de segurar a convergência, deve-se ter $|1 - \omega| < 1$, ou seja $0 < \omega < 2$. \square

4.4.3 Geração da Malha Computacional

O domínio adimensional do modelo num canal que tem o escoamento da água e a entrada de um poluente (mercúrio). Este é um canal retangular de dimensões $1 \times \frac{1}{10}$, onde a malha tem 60×30 pontos, conforme mostra a Figura 4.5.

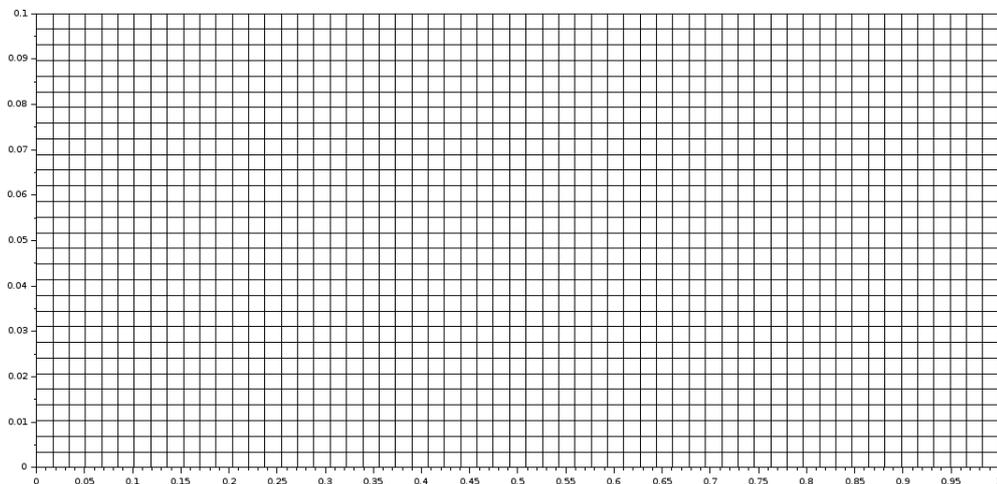


Figura 4.5: Malha bidimensional

4.5 Análise de Consistência e Estabilidade

Consistência é uma condição necessária para convergência, mas um esquema consistente não é necessariamente convergente. Por outro lado, a maioria dos esquemas de diferenças finitas usados são de fato consistentes. A maior dificuldade é obter a estabilidade, apesar disso ainda ser mais fácil de provar que a convergência [1],[15]. Analisando a consistência e estabilidade da forma discretizada da equação

diferencial parcial (4.10) e considerando $D_x = \frac{1}{Pe_x}$ e $D_y = \frac{1}{Pe_y}$ tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S \quad (4.24)$$

4.5.1 Consistência

Um requisito importante de uma aproximação de diferenças finitas é que ela seja consistente com a equação diferencial parcial que discretiza. Quando as derivadas de uma EDP são substituídas por diferenças, uma equação de diferenças finitas (EDF) é produzida e um erro introduzido, de forma que a solução exata da EDP não satisfaz a EDF precisamente. Um esquema ou operador de diferenças finitas é consistente se o operador se reduz à equação diferencial original à medida que os incrementos nas variáveis independentes desaparecem. A consistência pode ser definida de duas formas equivalentes, mas ligeiramente diferentes.

Definição 4.3. *Dado uma equação diferencial parcial, $Lu = f$, e um esquema de diferenças finitas $L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \nu = f$, dizemos que o esquema é consistente com a EDP, se para qualquer função $\phi(x, y, t)$ suave*

$$L\phi - L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \phi \rightarrow 0 \text{ quando } \Delta x, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0,$$

sendo a convergência pontual em cada ponto da malha [48], [44].

Analisando a consistência na Equação (4.24), para uma função $\phi(x, y, t)$ suave, seja $(j\Delta x, k\Delta y, n\Delta t)$. Considere,

$$L\phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - D_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_{j,k,n}. \quad (4.25)$$

A equação (4.24) aproximada por diferenças finitas resulta em:

$$\begin{aligned}
L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \phi &= \frac{\phi_{j,k,n+1} - \phi_{j,k,n}}{\Delta t} + u \left(\frac{\phi_{j+1,k,n} - \phi_{j-1,k,n}}{2\Delta x} \right) \\
&\quad - D_x \left(\frac{\phi_{j+1,k,n} - 2\phi_{j,k,n} + \phi_{j-1,k,n}}{(\Delta x)^2} \right) \\
&\quad - D_y \left(\frac{\phi_{j,k+1,n} - 2\phi_{j,k,n} + \phi_{j,k-1,n}}{(\Delta y)^2} \right)
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Aproximando $\phi_{j,k,n+1}$, $\phi_{j+1,k,n}$, $\phi_{j-1,k,n}$, $\phi_{j,k+1,n}$ e $\phi_{j,k-1,n}$ por expansão em séries de Taylor, resulta:

$$\begin{aligned}
\phi_{j,k,n+1} &= \phi(j\Delta x, k\Delta y, (n+1)\Delta t) = \phi(x_j, y_k, t_n + \Delta t) = \phi_{j,k,n} + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_{j,k,n} \\
&\quad + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_{j,k,n} + \frac{1}{6}(\Delta t)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{j+1,k,n} &= \phi((j+1)\Delta x, k\Delta y, n\Delta t) = \phi(x_j + \Delta x, y_k, t_n) = \phi_{j,k,n} + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{j,k,n} \\
&\quad + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{j,k,n} + \frac{1}{6}(\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.28}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{j-1,k,n} &= \phi((j-1)\Delta x, k\Delta y, n\Delta t) = \phi(x_j - \Delta x, y_k, t_n) = \phi_{j,k,n} - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{j,k,n} \\
&\quad + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{j,k,n} - \frac{1}{6}(\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{j,k+1,n} &= \phi(j\Delta x, (k+1)\Delta y, n\Delta t) = \phi(x_j, y_k + \Delta y, t_n) = \phi_{j,k,n} + \Delta y \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{j,k,n} \\
&\quad + \frac{1}{2}(\Delta y)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_{j,k,n} + \frac{1}{6}(\Delta y)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{j,k-1,n} &= \phi(j\Delta x, (k-1)\Delta y, n\Delta t) = \phi(x_j, y_k - \Delta y, t_n) = \phi_{j,k,n} - \Delta y \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{j,k,n} \\
&\quad + \frac{1}{2}(\Delta y)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_{j,k,n} - \frac{1}{6}(\Delta y)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.31}$$

As equações (4.27), (4.28), (4.29), (4.30) e (4.31) substituindo na equação (4.26) e fazendo simplificações resulta em:

$$\begin{aligned}
L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \phi &= \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - D_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_{j,k,n} + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_{j,k,n} \\
&+ u \frac{1}{6} (\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{j,k,n} - \frac{D_x (\Delta x)^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right)_{j,k,n} \\
&- \frac{D_y (\Delta y)^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} \right)_{j,k,n} + \dots
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Pode-se expressar a equação (4.32) como:

$$L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - D_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_{j,k,n} + O(\Delta t) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta y)^2) \tag{4.33}$$

e substituindo nas equações (4.25) e (4.33) tem-se:

$$L\phi - L_{\Delta x, \Delta y, \Delta t} \phi = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta y)^2) \rightarrow 0 \tag{4.34}$$

quando $\Delta t, \Delta x, \Delta y \rightarrow 0$. Portanto o esquema de diferenças finitas utilizado é consistente.

4.5.2 Análise de Estabilidade

A teoria da estabilidade para equações diferenciais parciais com condições de contorno mais gerais pode ser bastante difícil, já que o acoplamento entre a discretização das condições de contorno e a discretização da EDP pode ser muito sutil. A análise de Fourier-Von Neumann aborda a questão da estabilidade da discretização da EDP sozinha. Observa-se que a equação (4.24) é uma EDP não-homogênea. Para fazer a análise de estabilidade, todas as contribuições do termo não homogêneo estarão contidas no termo de truncamento [50].

Definição 4.4. *Dada um esquema em diferenças finitas L_h é estável com norma $\|\cdot\|$. Se*

$$\| U_h \| \leq M \| L_h U^h \| \leq M \| F^h \|,$$

para todo $h > 0$, onde U^h é a solução da equação diferencial, $L_h U^h = F^h$.

Considera-se C_{jk}^n como aproximações dos valores de $C(x_j, y_k, t_n)$ nos pontos de malha

$$(x_j, y_k, t_n) = (j\Delta x, k\Delta y, n\Delta t)$$

Na análise de estabilidade por Von Neumann, a decomposição discreta de Fourier em duas dimensões consiste na decomposição da função em uma série de Fourier como [45], [34]:

$$C_{j,k}^n = \sum_{\xi_x, \xi_y} \kappa^n e^{i\xi_x j\Delta x} e^{i\xi_y k\Delta y}, \quad (4.35)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, ξ_x e ξ_y é definido separadamente para cada direção. O fator de amplificação é dado por κ no instante n . Os produtos $\xi_x \Delta x$ e $\xi_y \Delta y$ são frequentemente denominados de ângulos de fase:

$$\theta_x = \xi_x \Delta x, \theta_y = \xi_y \Delta y.$$

Para obter uma condição de estabilidade de von Neumann, insere-se o modo Fourier:

$$\kappa^n e^{ij\theta_x} e^{ik\theta_y}.$$

A condição de estabilidade para uma equação de diferenças finitas será satisfeita se o fator κ^n não crescer com o tempo, isto é, se a razão

$$\left| \frac{\kappa^{n+1}}{\kappa^n} \right| \leq 1 \quad (4.36)$$

é válida para todo θ_x, θ_y . A quantidade G , definida por:

$$G = \frac{\kappa^{n+1}}{\kappa^n} \quad (4.37)$$

é o fator de amplificação.

Aproximando a equação (4.24), por diferenças finitas tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{C_{j,k}^{n+1} - C_{j,k}^n}{\Delta t} + u \left(\frac{C_{j+1,k}^n - C_{j-1,k}^n}{2\Delta x} \right) &= D_x \left(\frac{C_{j+1,k}^n - 2C_{j,k}^n + C_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} \right) \\ &+ D_y \left(\frac{C_{j,k+1}^n - 2C_{j,k}^n + C_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) \end{aligned} \quad (4.38)$$

e considera-se que:

$$\alpha = \frac{u\Delta t}{\Delta x}, \quad (4.39)$$

$$\beta = \frac{D_x\Delta t}{(\Delta x)^2}, \quad (4.40)$$

$$\gamma = \frac{D_y\Delta t}{(\Delta y)^2}. \quad (4.41)$$

Substituindo a expansão em séries de Fourier na equação (4.38), resulta:

$$\begin{aligned} \kappa^{n+1} e^{ij\theta_x} e^{ik\theta_y} &= \kappa^n e^{ij\theta_x} e^{ik\theta_y} - \frac{\alpha}{2} (\kappa^n e^{i(j+1)\theta_x} e^{ik\theta_y} - \kappa^n e^{i(j-1)\theta_x} e^{ik\theta_y}) \\ &+ \beta (\kappa^n e^{i(j+1)\theta_x} e^{ik\theta_y} - 2\kappa^n e^{ij\theta_x} e^{ik\theta_y} + \kappa^n e^{i(j-1)\theta_x} e^{ik\theta_y}) \\ &+ \gamma (\kappa^n e^{ij\theta_x} e^{i(k+1)\theta_y} - 2\kappa^n e^{ij\theta_x} e^{ik\theta_y} + \kappa^n e^{ij\theta_x} e^{i(k-1)\theta_y}) \end{aligned}$$

e fazendo simplificações tem-se:

$$\kappa^{n+1} = \kappa^n \left(1 - \frac{\alpha}{2} (e^{i\theta_x} - e^{-i\theta_x}) + \beta (e^{i\theta_x} - 2 + e^{-i\theta_x}) + \gamma (e^{i\theta_y} - 2 + e^{-i\theta_y}) \right).$$

Se $e^{i\theta_x} = \cos(\theta_x) + i\text{sen}(\theta_x)$ e $e^{-i\theta_x} = \cos(\theta_x) - i\text{sen}(\theta_x)$, então fica,

$$\begin{aligned} G = \frac{\kappa^{n+1}}{\kappa^n} &= 1 - i\alpha\text{sen}(\theta_x) + 2\beta (\cos(\theta_x) - 1) + 2\gamma (\cos(\theta_y) - 1) \\ &= 1 - 4(\beta\text{sen}^2(\frac{\theta_x}{2}) + \gamma\text{sen}^2(\frac{\theta_y}{2})) - i\alpha\text{sen}(\theta_x), \end{aligned}$$

onde o módulo ao quadrado desta equação é dado por

$$|G|^2 = \left(1 - 4(\beta \operatorname{sen}^2(\frac{\theta_x}{2}) + \gamma \operatorname{sen}^2(\frac{\theta_y}{2}))\right)^2 + (\alpha \operatorname{sen}(\theta_x))^2 \quad (4.42)$$

As condições limites são obtidas quando $\theta_x = \theta_y = \pi$ por um lado, e quando θ_x e θ_y vão para zero [24]. No primeiro caso, tem-se

$$\left(1 - 4(\beta \operatorname{sen}^2(\frac{\theta_x}{2}) + \gamma \operatorname{sen}^2(\frac{\theta_y}{2}))\right)^2 \leq 1$$

Daí isso leva a

$$0 \leq \beta + \gamma \leq \frac{1}{2} \quad (4.43)$$

No, segundo caso, realizando uma expansão em séries de Taylor em torno $\theta_x = 0$ e $\theta_y = 0$, com $|\theta_x| \leq \theta$ e $|\theta_y| \leq \theta$, e negligenciando termos de ordem superior, obtém-se:

$$\begin{aligned} |G|^2 &= (1 - (\beta\theta_x^2 + \gamma\theta_y^2))^2 + (\alpha\theta_x)^2 + O(\theta^4), \\ |G|^2 &= 1 - 2(\beta\theta_x^2 + \gamma\theta_y^2) + (\beta\theta_x^2 + \gamma\theta_y^2)^2 + (\alpha\theta_x)^2 + O(\theta^4). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Introduzindo os vetores $\vec{\theta} = (\theta_x, \theta_y)^T$ e $\vec{\alpha} = (\alpha, 0)^T$ na matriz diagonal $B = \operatorname{diag}(\beta, \gamma)$ e negligenciando o termo de ordem superior [23], resulta

$$|G|^2 = 1 - \vec{\theta}^T (2B - \vec{\alpha} \otimes \vec{\alpha}^T) \vec{\theta}.$$

Para que $|G|^2$ seja menor que um, a matriz simétrica $(2B - \vec{\alpha} \otimes \vec{\alpha}^T)$ deve ser não negativa, o que implica que $\alpha^2 < 2\beta$ e $\gamma > 0$. Se β é zero então α é também zero. Assim sendo assume-se que $\beta > 0$ na equação (4.43), o que implica em $0 < \beta + \gamma \leq \frac{1}{2}$. Definindo a matriz diagonal $E = \operatorname{diag}((2\beta)^{1/2}, (2\gamma)^{1/2})$ tem-se

$$2B - \vec{\alpha} \otimes \vec{\alpha}^T = E(I - E^{-1}\vec{\alpha} \otimes \vec{\alpha}^T E^{-1})E$$

e a matriz

$$A = I - (E^{-1}\vec{\alpha}) \otimes (E^{-1}\vec{\alpha})^T = I - \vec{d} \otimes \vec{d}^T$$

também deve ser definida de forma não negativa. Considerando a forma quadrática associada, para qualquer vetor bidimensional \vec{x} ,

$$\vec{x}^T A \vec{x} = \vec{x}^T (I - \vec{d} \otimes \vec{x}^T) \vec{x} = \vec{x}^T \cdot \vec{x} - (\vec{d}^T \cdot \vec{x})^2,$$

a matriz A é definida não negativa se e somente se $\vec{d}^T \cdot \vec{d} \leq 1$, então $\frac{\alpha^2}{2\beta} \leq 1$. Desta forma, as condições de Von Neumann para a equação (4.24) são

$$0 < \beta + \gamma \leq \frac{1}{2}, \quad (4.45)$$

e

$$\frac{\alpha^2}{2\beta} \leq 1, \quad (4.46)$$

Assumindo que $\alpha > 0$ e a desigualdade (4.46), obtém-se a seguinte desigualdade

$$(\alpha \text{sen}(\theta_x))^2 = \frac{\alpha^2}{\beta} (\beta \text{sen}^2(\theta_x)) \leq 2\beta \text{sen}^2(\theta_x) = 8\beta \text{sen}^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) \quad (4.47)$$

Logo, insertando está relação na expressão $|G|^2$, obtém-se

$$\begin{aligned} |G|^2 &\leq \left(1 - 4\left(\beta \text{sen}^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) + \gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right)\right)\right)^2 + 8\beta \text{sen}^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) \\ &= 1 - 8\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) - 8\gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right) + 16\left(\beta \text{sen}^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) + \gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right)\right)^2 \\ &= 1 - 8\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) - 8\gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right) + 16\left(\sqrt{\beta} \sqrt{\beta} \text{sen}^2\left(\frac{\theta_x}{2}\right) + \sqrt{\gamma} \sqrt{\gamma} \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right)\right)^2 \end{aligned}$$

e aplicando a desigualdade de Schwarz e a primeira condição de estabilidade (4.45), resulta

$$\begin{aligned} |G|^2 &\leq 1 - 8\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) - 8\gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right) + 16(\beta + \gamma)\left(\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) + \gamma \text{sen}^4\left(\frac{\theta_y}{2}\right)\right) \\ &\leq 1 - 8\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) - 8\gamma \text{sen}^2\left(\frac{\theta_y}{2}\right) + 8\beta \text{sen}^4\left(\frac{\theta_x}{2}\right) + 8\gamma \text{sen}^4\left(\frac{\theta_y}{2}\right). \end{aligned}$$

Fazendo as simplificações

$$|G|^2 \leq 1 - 2\gamma \text{sen}^2(\theta_y)$$

tem-se que $\gamma > 0$, então $1 - 2\gamma \text{sen}^2(\theta_y) < 1$. Portanto,

$$|G|^2 < 1$$

o que completa a prova de que as condições (4.45) e (4.46) são necessárias e suficientes para a estabilidade de Von Neumann (4.38) do problema em análise. A condição de estabilidade após substituir as equações (4.39), (4.40) e ((4.41)) nas equações (4.45) e (4.46) resulta em:

$$\frac{D_x \Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{D_y \Delta t}{(\Delta y)^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (4.48)$$

e

$$\frac{u^2 \Delta t}{2D_x} \leq 1. \quad (4.49)$$

Como $D_x = \frac{1}{Pe_x}$ e $D_y = \frac{1}{Pe_y}$, resulta que a equação de concentração adimensional é estável para as seguintes condições:

$$\frac{\Delta t}{Pe_x (\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{Pe_y (\Delta y)^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (4.50)$$

e

$$\frac{u^2 Pe_x \Delta t}{2} \leq 1. \quad (4.51)$$

Na modelagem, considerou-se a entrada da água no canal na direção do eixo x , de dimensões $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq y \leq 0,1$ e a entrada da concentração do poluente mercúrio no canal na direção do eixo y em $0,25 \leq x \leq 0,3$. O modelado foi baseado nas equações governantes do escoamento do fluido e a equação de concentração das espécies. Considerou-se o escoamento como newtoniano, incompressível, bidimensional, laminar e permanente. Apartir destas hipóteses, foram obtidas as equações da continuidade, quantidade de movimento, e concentração das espécies. Adimensionalizou-se as EDPs, e aproximou-se por diferenças finitas, gerando sistemas de equações lineares. Os sistemas de equações foram resolvidas pelo método

de Gauss-Seidel e a convergência foi acelerada pelo método de sobre-relaxação sucessiva. O código computacional foi implementado na linguagem de programação FORTRAN 90. Além disso, fez-se a análise de consistência e estabilidade da equação de concentração das espécies. Os do modelo serão mostrados no próximo capítulo.

5 RESULTADOS

Neste capítulo, apresenta-se os resultados numéricos e a solução analítica. Em ambas situações, considera-se o escoamento bidimensional num canal onde escoa água e com a entrada de um poluente (mercúrio). Considera-se os resultados no regime permanente, e que a convecção no eixo x é suficientemente grande em comparação do termo difusivo no eixo x . O termo fonte é considerado como constante. Mostra-se na Tabela 5.1 os dados para o modelo.

Tabela 5.1: Dados do modelo

símbolo	valores
Δx	$\frac{1}{59}$
Δy	$\frac{1}{290}$
Δt	0,00001
L	10m
ν	$1,003 \times 10^{-6} m^2/s$
k_x	$1,67 \times 10^{-9} m^2/s$
k_y	$300 \times k_x$
Re	700
S	0,5

onde o coeficiente de difusão k_x foi obtido em Kuss et al. [33].

Apartir destes valores são obtidos os resultados e compara-se a solução numérica e analítica bidimensional, mostrando-se as isolinhas da concentração do poluente no regime permanente.

5.1 Solução Analítica

As soluções analíticas servem como ferramentas valiosas para a verificação dos resultados obtidos a partir de métodos numéricos. A segunda carac-

terística de tais soluções é que elas fornecem uma melhor visão do problema, definindo o agrupamento de parâmetros físicos que os governam. Boa parte dos trabalhos encontrados na literatura sobre a concentração de poluentes são soluções analíticas: de convecção e difusão considerando o tempo mas sem o termo fonte unidimensional no domínio infinito [28], e para um domínio finito [37]; para um domínio infinito e tridimensional [52],[47], com termo fonte e considerando o tempo e domínio infinito [25].

Neste trabalho, a equação de concentração é uma equação diferencial parcial linear não homogênea bidimensional, com uma das condições de contorno não homogênea e descontínua, o que torna a solução analítica do problema complexa. Para a solução deste problema considera-se as seguintes hipóteses: (i) regime permanente, (ii) convecção suficientemente grande, comparada a difusão. (iii) termo fonte S e a velocidade u constantes. Com base nestas hipóteses, será aplicado a transformada da Laplace, para o domínio $x \geq 0$ e $0 \leq y \leq \frac{1}{10}$. Antes de começar a obtenção da solução analítica, lembraremos de algumas propriedades da transformada de Laplace inversa:

Teorema 5.1. *Seja $\mathcal{L}^{-1}\{f(s)\} = F(t)$. Então*

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{f(s)}{s}\right\} = \int_0^t F(u)du \quad (5.1)$$

e

$$\mathcal{L}^{-1}\{f(ks)\} = \frac{1}{k}F\left(\frac{t}{k}\right) \quad (5.2)$$

Demonstração. A prova destas propriedades pode ser encontrada em Spiegel [46].

□

As seguintes transformadas de Laplace inversa serão usadas na solução analítica:

$$1. \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh \sqrt{ks}(a-x)}{s \sinh \sqrt{ksa}} \right\}, \text{ onde } k > 0 \text{ e } 0 < x < a.$$

Para a solução desta transformada de Laplace, primeiro resolve-se:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh \sqrt{s}(a-x)}{s \sinh \sqrt{sa}} \right\}. \quad (5.3)$$

Achar a solução da equação (5.3) é encontrar os pólos, e a função tem pólos simples [8], [43]: $s_0 = 0$ e $\sqrt{s_n} = \frac{in\pi}{a}$ que podem ser reescritos como $s_n = -\frac{n^2\pi^2}{a^2}$; $n = 1, 2, 3, \dots$. O resíduo para $s_0 = 0$ é:

$$\begin{aligned} Res(0) &= \lim_{s \rightarrow 0} (s-0) \left(\frac{e^{st} \sinh \sqrt{s}(a-x)}{s \sinh \sqrt{sa}} \right) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \left(\frac{\sinh \sqrt{s}(a-x)}{\sinh \sqrt{sa}} \right) e^{st}, \end{aligned}$$

e aplicando a regra de L'Hospital, então o resíduo torna-se $Res(0) = \frac{a-x}{a}$.

Para o resíduo $s_n = -\frac{n^2\pi^2}{a^2}$; $n = 1, 2, 3, \dots$ tem-se

$$\begin{aligned} Res\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right) &= \lim_{s \rightarrow s_n} (s-s_n) \left(\frac{e^{st} \sinh \sqrt{s}(a-x)}{s \sinh \sqrt{sa}} \right), \\ Res\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right) &= \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{s-s_n}{\sinh \sqrt{sa}} \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{\sinh \sqrt{s}(a-x)e^{st}}{s}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Aplicando a regra de L'Hospital no limite da esquerda na equação (5.4)

resulta

$$Res\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right) = \lim_{s \rightarrow s_n} \left(\frac{2\sqrt{s}}{a \cosh \sqrt{sa}} \right) \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{\sinh \sqrt{s}(a-x)e^{st}}{s},$$

levando ao limite e fazendo arranjos, obtém-se

$$Res\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right) = -\frac{2}{n\pi} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2} t}.$$

As somas de todos os resíduos é:

$$\sum Res = \frac{a-x}{a} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2} t}.$$

Portanto, tem-se a solução da equação (5.3)

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{s}(a-x)}{s \operatorname{senh}\sqrt{sa}} \right\} = \frac{a-x}{a} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2} t}. \quad (5.5)$$

Utilizando a propriedade (5.2) na equação (5.5) tem-se:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{ks}(a-x)}{s \operatorname{senh}\sqrt{ksa}} \right\} = \frac{a-x}{a} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2 k} t}. \quad (5.6)$$

2. Determina-se a transformada de Laplace inversa de $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{ks}(a-x)}{s^2 \operatorname{senh}\sqrt{ksa}} \right\}$.

Para encontrar a solução, usa-se a equação (5.5) e a propriedade (5.2)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{s}(a-x)}{s^2 \operatorname{senh}\sqrt{sa}} \right\} &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{s}(a-x)}{s \operatorname{senh}\sqrt{sa}} \right\} \\ &= \int_0^t \left(\frac{a-x}{a} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2} \tau} \right) d\tau, \end{aligned}$$

logo, a solução da integral é

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{s}(a-x)}{s^2 \operatorname{senh}\sqrt{sa}} \right\} = \left(\frac{a-x}{a} \right) t + \frac{2a^2}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2} t} - 1 \right). \quad (5.7)$$

Finalmente, aplicando a propriedade (5.2) na equação (5.7) obtém-se:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\operatorname{senh}\sqrt{ks}(a-x)}{s^2 \operatorname{senh}\sqrt{ksa}} \right\} = \left(\frac{a-x}{a} \right) t + \frac{2a^2 k}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(e^{-\frac{n^2\pi^2}{a^2 k} t} - 1 \right) \quad (5.8)$$

3. A transformada de Laplace inversa da equação (5.9), é obtida fazendo a mudança da variável na equação (5.7). Logo, obtém-se:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh \sqrt{s} x}{s^2 \sinh \sqrt{s} a} \right\} = \left(\frac{x t}{a} \right) + \frac{2a^2}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^3} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(1 - e^{-\frac{n^2 \pi^2}{a^2} t} \right), \quad (5.9)$$

e utilizando a propriedade (5.2), obtém-se

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh \sqrt{k} s x}{s^2 \sinh \sqrt{k} s a} \right\} = \left(\frac{x t}{a} \right) + \frac{2a^2 k}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^3} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(1 - e^{-\frac{n^2 \pi^2}{a^2 k} t} \right). \quad (5.10)$$

Na obtenção da solução da equação diferencial parcial bidimensional, onde termo fonte $S > 0$ e a velocidade $u > 0$,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S \quad (5.11)$$

considere-se as seguinte hipóteses:

- Para regime permanente, diz-se que $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$, então

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S. \quad (5.12)$$

- A convecção é suficientemente grande comparada à difusão na direção x , $\frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$; logo tem-se

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S. \quad (5.13)$$

A equação (5.13) será resolvida com seguintes condições:

$$C(0, y) = 0; \quad (5.14)$$

$$C(x, 0) = \mathcal{H}(x - 0, 25) - \mathcal{H}(x - 0, 3); \quad (5.15)$$

$$C(x, \frac{1}{10}) = 0 \quad (5.16)$$

onde $\mathcal{H}(x - 0, 25) - \mathcal{H}(x - 0, 3)$ é a função Heaviside, o que implica em:

$$\mathcal{H}(x - 0, 25) - \mathcal{H}(x - 0, 3) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x < 0, 25; \\ 1 & \text{se } 0, 25 \leq x < 0, 3; \\ 0 & \text{se } x \geq 0, 3. \end{cases}$$

Para obter a solução:

Primeiro: Aplica-se a transformada de Laplace com respeito a x .

Considera-se $\mathcal{L}\{C(x, y)\} = X(\eta, y)$, então aplica-se transformada de Laplace na equação (5.13) com respeito a x :

$$u\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial x}\right\} = \frac{1}{Pe_y}\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right\} + S\mathcal{L}\{1\}. \quad (5.17)$$

Note que,

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial x}\right\} = \eta X(\eta, y) - C(0, y); \quad \mathcal{L}\{1\} = \frac{1}{\eta} \quad (5.18)$$

e aplicando a transformada de Laplace na equação (5.15) com respeito a x resulta

$$\mathcal{L}\{C(x, 0)\} = X(\eta, 0) = \mathcal{L}\{\mathcal{H}(x - 0, 25)\} - \mathcal{L}\{\mathcal{H}(x - 0, 3)\} \quad (5.19)$$

onde a transformada de Laplace da função Heaviside é dada por:

$$X(\eta, 0) = \frac{e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}}{\eta}, \quad (5.20)$$

De forma semelhante para a equação (5.16), tem-se:

$$\mathcal{L}\left\{C(x, \frac{1}{10})\right\} = X(\eta, \frac{1}{10}) = 0. \quad (5.21)$$

Substituindo a equação (5.18) em (5.17), tem-se:

$$u(\eta X(\eta, y) - C(0, y)) = \frac{1}{Pe_y}\frac{\partial^2 X(\eta, y)}{\partial y^2} + \frac{S}{\eta}, \quad (5.22)$$

e usando a condição (5.14), a equação (5.22) pode ser expressa como:

$$\frac{\partial^2 X(\eta, y)}{\partial y^2} - u\eta Pe_y X(\eta, y) = -\frac{Pe_y S}{\eta}, \quad (5.23)$$

considerando $u\eta Pe_y > 0$ e $\frac{Pe_y S}{\eta} > 0$.

Segundo: Determina-se a solução da equação diferencial ordinária não homogênea.

$$\frac{\partial^2 X(\eta, y)}{\partial y^2} - u\eta Pe_y X(\eta, y) = -\frac{Pe_y S}{\eta} \quad (5.24)$$

Para resolver equações diferenciais ordinárias não homogêneas, tem-se que encontrar a solução da parte homogênea X_c , e a solução da parte não homogênea ou solução particular X_p , onde a solução geral é $X = X_c + X_p$. Primeiro acha-se a solução da parte homogênea.

$$\frac{\partial^2 X(\eta, y)}{\partial y^2} - aX(\eta, y) = 0, \quad (5.25)$$

e obtém-se a equação característica dada da seguinte forma:

$$r^2 - u\eta Pe_y = 0, \quad (5.26)$$

onde $r_1 = \sqrt{u\eta Pe_y}$ e $r_2 = -\sqrt{u\eta Pe_y}$, são duas raízes diferentes e reais. Logo, a solução da equação é dada por:

$$X_c = c_1 \cosh(\sqrt{u\eta Pe_y} y) + c_2 \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} y). \quad (5.27)$$

A solução particular, é uma função constante A :

$$X_p = A, \quad (5.28)$$

que substituída na equação (5.24) resulta em:

$$A = \frac{S}{u\eta^2}. \quad (5.29)$$

A solução geral da equação diferencial (5.24) torna-se:

$$X(\eta, y) = c_1 \cosh(\sqrt{u\eta Pe_y} y) + c_2 \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} y) + \frac{S}{u\eta^2}. \quad (5.30)$$

Para $y = 0$ na equação (5.30) e condição de contorno (5.20), tem-se

$$X(\eta, 0) = c_1 + \frac{S}{u\eta^2} = \frac{e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}}{\eta}, \quad (5.31)$$

e obtém-se o coeficiente c_1

$$c_1 = \frac{e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}}{\eta} - \frac{S}{u\eta^2}. \quad (5.32)$$

De forma semelhante, para obter o coeficiente c_2 , para $y = \frac{1}{10}$ na equação (5.30), tem-se

$$X(\eta, \frac{1}{10}) = \left(\frac{e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}}{\eta} - \frac{S}{u\eta^2} \right) \cosh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10}) + c_2 \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10}) + \frac{S}{u\eta^2}, \quad (5.33)$$

e substituindo a condição de contorno (5.21) na equação (5.33), obtém-se o coeficiente c_2 :

$$c_2 = -\frac{S}{u\eta^2} \left(\frac{1}{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right) + \left(\frac{S}{u\eta^2} \frac{\cosh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})}{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right) - \frac{e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}}{\eta} \left(\frac{\cosh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})}{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right). \quad (5.34)$$

Logo, usando $\sinh(x \pm y) = \sinh x \cosh y \pm \cosh x \sinh y$ a solução geral torna-se:

$$\begin{aligned}
X(\eta, y) = & (e^{-0,25\eta} - e^{-0,3\eta}) \left(\frac{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y}(\frac{1}{10} - y))}{\eta \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right) \\
& - \frac{S}{u} \left(\frac{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y}(\frac{1}{10} - y))}{\eta^2 \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right) \\
& - \frac{S}{u} \left(\frac{\sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} y)}{\eta^2 \sinh(\sqrt{u\eta Pe_y} \frac{1}{10})} \right) + \frac{S}{u\eta^2}.
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Terceiro Aplicando a transformada de Laplace inversa em (5.35).

Aplica-se a transformada inversa com respeito a ρ . Se $\mathcal{L}^{-1}\{X(\eta, y)\} = C(x, y)$ e usando a propriedade $\mathcal{L}^{-1}\{e^{-a\eta} X(\eta, y)\} = C(x - a, y)\mathcal{H}(x - a)$, onde $a > 0$, tem-se

$$\begin{aligned}
C(x, y) = & \mathcal{H}(x - 0, 25) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta (\frac{1}{10} - y))}{\rho \sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta \frac{1}{10})} \right\}_{x \rightarrow x-0,25} \\
& - \mathcal{H}(x - 0, 3) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta (\frac{1}{10} - y))}{\eta \sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta \frac{1}{10})} \right\}_{x \rightarrow x-0,3} \\
& - \frac{S}{u} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta (\frac{1}{10} - y))}{\rho^2 \sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta \frac{1}{10})} \right\} \\
& - \frac{S}{u} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta y)}{\eta^2 \sinh(\sqrt{u Pe_y} \eta \frac{1}{10})} \right\} + \frac{S}{u} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{\eta^2} \right\}
\end{aligned} \tag{5.36}$$

Assim, usando as equações (5.6), (5.8) e (5.10) na equação (5.36) e fazendo simplificações, obtém-se a solução da equação (5.13).

$$\begin{aligned}
C(x, y) = & \left((1 - 10y) - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{sen}(10n\pi y) e^{-\frac{100n^2\pi^2}{uPe_y}(x-0,25)} \right) \mathcal{H}(x - 0, 25) \\
& - \left((1 - 10y) - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{sen}(10n\pi y) e^{-\frac{100n^2\pi^2}{uPe_y}(x-0,3)} \right) \mathcal{H}(x - 0, 3) \\
& + \frac{Pe_y S}{50\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - (-1)^n)}{n^3} \text{sen}(10n\pi y) \left(1 - e^{-\frac{100n^2\pi^2}{uPe_y}x} \right) \quad (5.37)
\end{aligned}$$

Na Figura 5.1, mostra-se as isolinhas da solução analítica, que foi obtida da seguinte equação:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S,$$

para $x \geq 0$ e $0 \leq y \leq \frac{1}{10}$, com condições de contorno: $C(0, y) = 0$, $C(x, 0) = \mathcal{H}(x - 0, 25) - \mathcal{H}(x - 0, 3)$ e $C(x, \frac{1}{10}) = 0$.

Os dados do modelo analítico são indicados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Dados do modelo analítico

símbolo	valores
Δx	1/59
Δy	1/290
Δt	0,00001
L	10m
u	0.5
k_y	$501 \times 10^{-9} m^2/s$
S	0,5

Onde u é a velocidade meia da água.

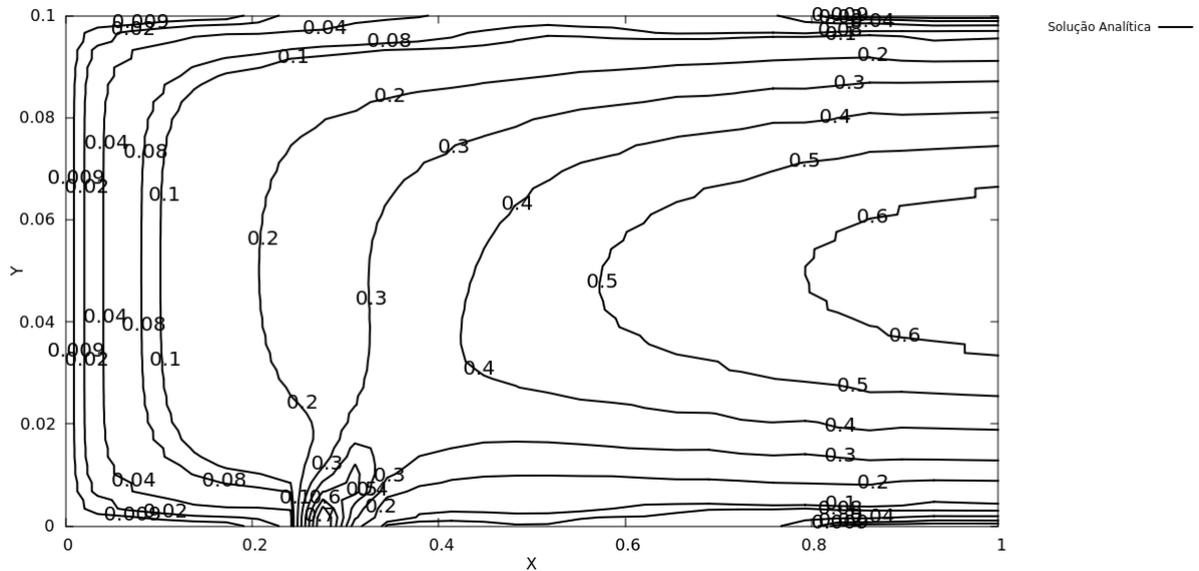


Figura 5.1: Isolinhas de concentração da solução analítica

Na Figura 5.1 mostra-se as isolinhas da concentração do poluente. O espalhamento do poluente é influenciado pela velocidade da água na direção do eixo x , e apresenta comportamento idealizado pelo modelo analítico.

5.2 Solução Numérica

A solução numérica foi obtida com base nas equações governantes do escoamento do fluido e a equação da concentração da espécie, com condições de contorno e condições iniciais.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + S,$$

onde $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq y \leq \frac{1}{10}$, e os dados mostrados na Tabela 5.1. Resultam as isolinhas da equação da concentração das espécies mostradas na Figura 5.2.

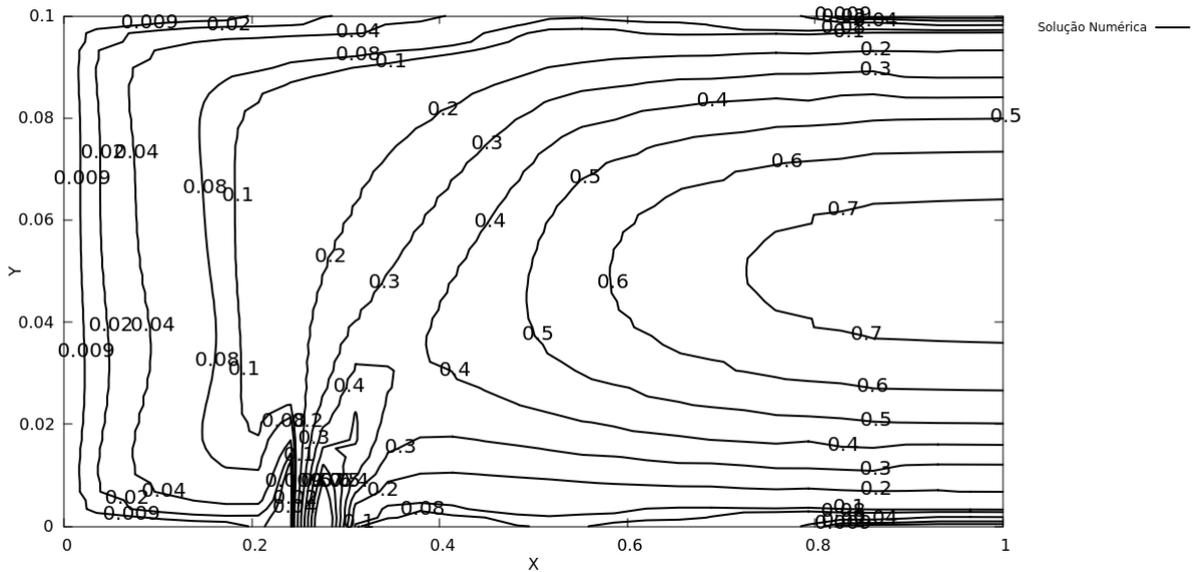


Figura 5.2: Isolinhas de concentração da solução numérica

Observa-se, na Figura 5.2, que as isolinhas da concentração para valores maiores que 0,4 apresentam maior espalhamento do poluente. Na região esquerda à entrada do poluente tem-se uma pequena acumulação devido ao fluxo cruzado entre poluente e água. O tempo computacional para obtenção desta solução foi de aproximadamente 40 minutos num computador Intel-Core I3; para erro na concentração menor que 10^{-5} .

A comparação da solução analítica e numérica é mostrada na Figura 5.3

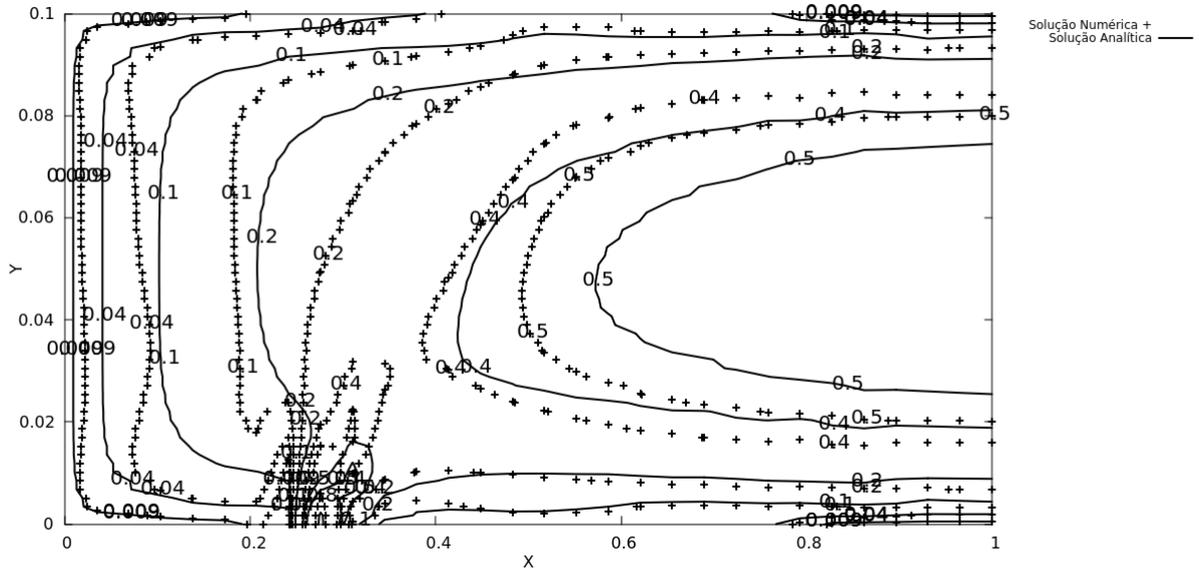


Figura 5.3: Comparação da solução analítica e numérica: isolinhas de concentração

O resultado apresentado na Figura 5.3 representa as isolinhas da concentração da solução analítica e numérica. Nota-se maior espalhamento do poluente na solução analítica para valores maiores de 0,4, uma vez que esta tende a ser mais difusiva. Na solução analítica a componente da velocidade é mantida constante.

O erro global da comparação da solução dos modelos numérico e analítico, é representado por:

$$r_m = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (C_{A_i} - C_{N_i})^2 \right)^{1/2},$$

onde C_A representa a solução analítica da concentração da espécie, C_N a solução numérica da concentração da espécie, e $n = 1800$ o número de pontos na malha. Obtém-se um erro global de $r_m = 0.0727$ (ou de 7,27 %).

6 CONCLUSÕES E CONTRIBUIÇÕES

Nesta pesquisa, o objetivo principal foi desenvolver um modelo matemático para a distribuição da concentração do poluente mercúrio na água. O modelo é um canal bidimensional, com escoamento em regime permanente e incompressível. As equações governantes do escoamento foram discretizadas por diferenças finitas, que gerou sistemas lineares e que foram resolvidas pelo método de Gauss Seidel. Para acelerar a convergência usou-se o método SOR.

Um dos objetivos específicos foi analisar a consistência da discretização da equação da concentração, que tem ordem de precisão de $O(\Delta t) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta y)^2)$. Também foi analisada a condição de estabilidade, que resultou nas condições $\frac{\Delta t}{Pe_x(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{Pe_y(\Delta y)^2} \leq \frac{1}{2}$, e $\frac{u^2 Pe_x \Delta t}{2} \leq 1$.

Foram comparadas a solução numérica do modelo com a solução analítica, considerando em ambas regime permanente, com convecção em x suficientemente maior que a difusão no eixo x , e com termo fonte constante. Obteve-se concordância razoável entre os resultados.

6.1 Contribuições

O modelo matemático foi desenvolvido para escoamento em regime permanente, bidimensional e incompressível. As equações governantes foram discretizadas em diferenças finitas, o que gerou sistemas de equações lineares que foram resolvidas pelo método iterativo de Gauss Seidel e acelerou-se a convergência pelo método SOR, para as equações da quantidade de movimento, pressão e concentração.

Uma das contribuições desta pesquisa foi a obtenção da solução analítica da concentração do poluente, com termo fonte constante e uma das condições de contorno não homogênea e descontínua. Outra contribuição foi obter o modelo numérico para o espalhamento de poluente na água baseado nas equações governantes do escoamento do fluido e com a equação de concentração das espécies.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Para que o modelo seja mais realístico, faz-se necessário considerar o caso turbulento, pois é o tipo de movimentação que tem a água ou ar, além de considerar a terceira dimensão. Outra proposta seria considerar o caso de um canal não limitado no eixo y , podendo-se estender o modelo para o caso de rios, lagos e mares. Também se poderia trabalhar no regime não permanente, como foi mencionado na motivação, em situações onde a previsão da dispersão do poluente é crucial para a tomada de decisões eficazes e rápidas.

Referências Bibliográficas

- [1] R. P. Agarwal and D. O'Regan. *Ordinary and Partial Differential Equations: With Special Functions, Fourier Series, and Boundary Value Problems*. Springer, 2009.
- [2] F. Baldi. Microbial transformation of mercury species and their importance in the biogeochemical cycle of mercury. *Met. Ions Biol. Syst*, 34:213–257, 1997.
- [3] B. A. Bessinger, D. Vlassopoulos, S. Serrano, and P. A. O'Day. Reactive transport modeling of subaqueous sediment caps and implications for the long-term fate of arsenic, mercury, and methylmercury. *Aquat Geochem*, 18:297–326, 2012.
- [4] L. Y. Bin and C. Yong. Progress in the study of mercury methylation and demethylation in aquatic environments. *Chinese Science Bulletin*, 58:177–185, 2013.
- [5] M. C. Bisinoti. Tropicais a partir do Hg^0 : Experimentos em Microcosmos. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, 2002.
- [6] J. Blazek. *Computational Fluid Dynamics: Principales and Applications*. Elseiver, 2001.
- [7] J. W. Brown and R. V. Churchill. *Fourier Series and Boundary Value Problems*. McGraw-Hill, 5th edition, 1993.
- [8] J. W. Brown and R. V. Churchill. *Complex Variables and Applications*. McGraw-Hill, 8th edition, 2009.
- [9] R. L. Burden and J. D. Faires. *Numerical Analysis*. Richard Stratton, 9th edition, 2010.

- [10] A. J. Chorin and J. E. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer-Verlag, 3rd edition, 2000.
- [11] G. C. Compeau and R. Bartha. Sulfate-reducing bacteria: principal methylators of mercury in anoxic estuarine sediment. *Appl. and Environman Microbiol*, 50:498–502, 1985.
- [12] J. M. Cooper. *Introduction to Partial Differential Equations with MATLAB*. Springer Science and Business Media, 1997.
- [13] A. L. De Bortoli, S. L. A. Greice, and F. N. Pereira. *Modeling and Simulation of Reactive Flows*. Elsevier Science Publishing, 1th edition, 2015.
- [14] L. C. de Castro Santos. *Métodos Numéricos para Escoamento em Alta Velocidade*. Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, 1999.
- [15] P. Duchateau and D. Zachmann. *Applied Partial Differential Equations*. Harper & Row, 2002.
- [16] J. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 3rd edition, 2002.
- [17] W. F. Fitzgerald and C. H. Lamborg. Geochemistry of mercury in the environment. *Elseiver*, 9:107–148, 2003.
- [18] C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics 2*. Springer-Verlag, 2006.
- [19] J. Fritz. *Lectures on Advanced Numerical Analysis*. Gordon and Breach, 1996.
- [20] R. Haberman. *Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems*. Pearson, 5th edition, 2013.

- [21] A. Hadjidimos. Successive overrelaxation (sor) and related methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 123:177–199, 2000.
- [22] M. Harada. Minamata disease: methylmercury poisoning in japan caused by environmental pollution. *Crit Rev Toxicol.*, 25(1):1–24, 1995.
- [23] A. Hindmarsh, P. Gresho, and D. Griffiths. The stability of explicit Euler time-integration for certain finite difference approximations of the multi-dimensional advection-diffusion equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 4:853–897, 1984.
- [24] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Numerical Discretization*. Jonh Willey-Sons, 1988.
- [25] E. Holzbecher. *Environmental Modeling: Using MATLAB*. Springer, 2012.
- [26] L. D. Hylander and M. Meilli. 500 years of mercury production: global annual inventory by region until 2000 and associated emissions. *The Total Environmets*, 304:13–27, 2003.
- [27] F. P. Incropera, A. S. Lavine, T. L. Bergman, and D. P. DeWitt. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley, 6th edition, 2007.
- [28] D. K. Jaiswal, A. Kumar, and R. R. Yadav. Analytical solution to the one-dimensional advection-diffusion equation with temporally dependent coefficients. *Water Resource and Protection*, 3:76–84, 2011.
- [29] B. K. Jha, N. Adlakha, and M. N. Mehta. Analytic solution of two dimensional advection diffusion equation arising in cytosolic calcium concentration distribution. *International Mathematical Forum*, 7:135 –144, 2012.
- [30] Y. R. Jung, W. G. Park, and O. H. Park. Pollution dispersion analysis using the puff model with numerical flow field data. *Mechanics Research Communication*, 30:277–286, 2003.

- [31] T. Kambe. *Elementary Fluid Mechanics*. World Scientific, 2007.
- [32] J. Kunes. *Dimensionless Physical Quantities in Science and Engineering*. Elsevier, 2012.
- [33] J. Kuss, J. Holzmann, and R. Ludwing. An elemental mercury diffusion coefficient for natural waters determined by molecular dynamics simulation. *Environmental Science and Technology*, 43:3183–3106, 2009.
- [34] R. J. LeVeque. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-state and Time-Dependent Problems*. Siam, 2007.
- [35] G. K. Luk and W. C. Au-Yeung. Modelling human exposure of methylmercury from fish consumption: a review. *Water Qual. Res.*, 41:1–15, 2006.
- [36] S. Meddah, A. Saidane, M. Hadjel, and O. Hirecher. Pollutant dispersion modeling in natural streams using the transmission line matrix method. *Water*, 7:4932–4950, 2015.
- [37] M. F. Mohsen and M. H. Baluch. An analytical solution of the diffusion convection equation over a finite domain. *Appl Math Modelling*, 7:285–287, 1983.
- [38] M. Monperrus. Utilisation de traceurs isotopiques stables pour la spéciation du mercure et des butyleains application à l’étude de la biométhylation du mercure dans les environnements aquatiques. Master’s thesis, l’Université de Pau et des Pays de l’Adour, 2004.
- [39] Y. Nakayama. *Introduction to Fluid Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 1999.
- [40] E. S. Nascimento and A. A. M. Chasin. Ecotoxicologia do mercúrio e seus compostos. *Centro de Recursos Ambientais*, 1, 2001.

- [41] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor&Francis, 1980.
- [42] T. Sauer. *Numerical Analysis*. Pearson, 2th edition, 2012.
- [43] J. L. Schiff. *The Laplace Transform: Theory and Applications*. Springer-Verlag, 1999.
- [44] G. D. Smith. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Oxford university press, 1985.
- [45] E. Sousa. Finite difference for the convection-diffusion equation: On stability and boundary conditions. Master's thesis, The University of Oxford, 2001.
- [46] M. R. Spiegel. *Schaum's Outline of Theory and Problems of Laplace Transforms*. McGraw-Hill, 1965.
- [47] J. M. Stockie. The mathematics of atmospheric dispersion modeling. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 53:349–372, 2011.
- [48] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- [49] J. C. Tannehill, A. A. Dale, and R. H. Pletcher. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Taylor&Francis, 2rd edition, 1984.
- [50] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer Science- Business Media, 2013.
- [51] S. M. Ullrich, T. W. Tanton, and S. A. Abdrashitova. Mercury in the aquatic environment: a review of factors affecting methylation. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 31:241–293, 2001.
- [52] W. J. Veigele and J. H. Head. Derivation of the gaussian plume model. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 28:1139–1140, 1978.

- [53] Q. Wang, D. Kim, D. D. Dionysiou, G. A. Sorial, and D. Timberlake. Sources and remediation for mercury contamination in aquatic systems a literature review. *Environmental pollution*, 131:323–336, 1987.
- [54] J. R. Welty, C. E. Wicks, R. E. Wilson, and G. L. Rorrer. *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*. John Wiley-Sons, 5th edition, 2008.
- [55] Y. Zhou. Assessment of mercury methylation in aquatic sediments. Master's thesis, University Cincinnati, 2003.