*Biomatemática* ***32*** *(2022), 87–104* ***ISSN 1679-365X***
*Uma publicação do grupo de Biomatemática IMECC – Unicamp*

# Modelagem matemática para descrever a dispersão de poluente no igarapé do Pantanal-AM

Lacelmo Jr. Martins[1],
UEA, 69.135-000, São Sebastião do Uatumã/AM.

Carlos F. L. Santos[2],
DMAT, UEA, 69.050-010, Manaus/AM.

**Resumo**. A poluição em meios aquáticos é uma contaminação por resíduos na água dos rios, lagos, igarapés, entre outros. Trata-se de um problema sócio-ambiental de alto risco a vida, visto que, a água é vital a sobrevivência no planeta. Entre os motivos da poluição em meio aquáticos destacam-se as ações antrópicas relativas às atividades econômicas. Entre as várias consequências, Diniz (1994) diz que em cada quatro problemas que afetam o desenvolvimento e comportamento das crianças atualmente, um pode estar relacionado a fatores genéticos e ambientais, dentre os quais se inclui a exposição a compostos neurotróxicos como o chumbo e os pesticidas organofosfatos. Diante disso, faz-se necessário desenvolver ações de preservação e de recuperação às áreas degradadas, sendo assim, o objetivo desse estudo é propor um modelo matemático que descreva a dispersão de um material impactante no Igarapé do Pantanal, localizado na cidade de São Sebastião do Uatumã-AM. O modelo matemático será descrito por uma Equação Diferencial Parcial linear ($EDP$). O modelo considera fenômenos de dispersão, combinado às $EDP$ de difusão-advecção, decaimento e uma fonte poluidora. Simulações computacionais foram performadas a fim de apresentar possíveis e prováveis cenários da região impactada pelo poluente. Os resultados numéricos computaciomais, obtidos via discretização do modelo pela técnica de diferenças finitas mostram-se de a cordo com a realidade de campo.

***Palavras-chave***: *Biomatemática, equações diferenciais, métodos numéricos.*

[1]ljmds.mmt18@uea.edu.br
[2]cfsantos@uea.edu.br

# 1. Introdução

Fenômenos como dispersão, impactos ambientais e diversos fenômenos biológicos vêm sendo estudados, analisados e discutidos por muitos estudiosos da modelagem matemática.

De acordo com Souza (2018), a importância da modelagem se faz necessária por ser uma ferramenta capaz de criar representações simplificadas dos sistemas ecológicos complexos com o objetivo de processar simulações e análises sobre os ecossistemas de interesse que em muitos casos é de difícil acesso.

A modelagem matemática de fenômenos biológicos vem sendo estudada desde Thomas Malthus ($1766 - 1834$), que apresenta um modelo de crescimento exponencial de uma população, Malthus (2012), passando pelo modelo logístico de Verhulst ($1804 - 1849$), mostrando que uma população não crescerá exponencialmente devido a um fator limitante, Campos (2019) e o modelo de Lotka-Volterra ($1925 - 1939$), que descreve interações entre duas espécies, Batschelet (1978).

Os modelos mencionados acima são descritos por Equações Diferenciais Ordinárias que consideram apenas a variação temporal. Neste trabalho, o interesse principal são as Equações Diferenciais Parciais lineares, clássico no contexto da modelagem de dispersão, envolvendo equação de difusão-advecção, cuja dimensão espacial apresenta importância relevante.

Nas alterações ambientais, como mudança de áreas conservadas para áreas degradadas, podem surgir efeitos ecológicos, ambientais e modificações nas características dos cenários, que afetam diretamente a biodiversidade, o equilíbrio ecológico, entre outros.

A proposta deste estudo é modelar matematicamente a dispersão de um material impactante no Igarapé do Pantanal no município de São Sebastião do Uatumã-AM, a fim de descrever os futuros cenários e estimar o tempo de degradação dessa região.

O modelo proposto neste trabalho é resolvido numericamente, aproximando-se a variável espacial pelo método de Diferenças Finitas centrais de segunda ordem e a variável temporal pelo de Diferenças Finitas de Crank-Nicolson. Para isso, simulações computacionais foram performadas resolvendo-se o modelo discretizado, com o intuito de visualizar a dinâmica espaço-temporal do processo de dispersão do poluente.

Em relação aos cenários resultantes da dispersão do poluente é importante modelar, aproximar as soluções numericamente e simular computacionalmente os possíveis e prováveis cerários e tempo que lavará para degradação ambiental.

# 2. Métodos

## 2.1. Modelo matemático

O modelo matemático que descreve a concentração do poluente $P = P(x, y, t)$ em cada ponto *(x,y)* do domínio retangular $\Omega = (a; b) \times (a; c) \subset R^2$, aberto, não vazio e fronteiras suficientemente regular em cada instante de tempo $t \in (0, T]$, sendo $T$ o tempo final, será descrito pela equações diferenciais parciais:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = div(\alpha \Delta P) - div(P \cdot V) - \mu P + f. \tag{2.1}$$

Na modelagem por EDP, a equação 2.1 considera os seguintes fenômenos:

**Difusão**: será considerada a difusão efetiva no sentido de Marchuk (1986), Okubo (1980) e descrita por $\alpha = \alpha(x, y, t)$;

**Advecção**: considera-se o vento como um campo advectivo, cuja direção e magnitude são representadas, respectivamente, por $V = (u, v)$ com $u = u(x, y), v = v(x, y)$, $\mathbf{div}(V) = 0$ e será considerada de acordo com Prestes e Meyer (2013);

**Decaimento**: representado por $\mu = \mu(x, y, t)$;

**f**: fonte poluidora.

## 2.2. Condição de fronteiras

Para as condições de fronteira considera-se $\Gamma_i$, $i = 1, ..., 4$, uma partição da fronteira $\partial\Omega$. Recorre-se às condições homogêneas de Robin, que descrevem uma variação de $P$ na fronteira dependente do próprio $P$ ao longo da borda, Santos (2013).

Considerando as condições definida por:

$$-\alpha \frac{\partial P}{\partial \eta}\bigg|_{\Gamma_i} = b_i P,$$

em que, $b_i, i = 1, ..., 4$, são as constantes de proporcionalidades adequados para a condições escolhidas em cada parte $\Gamma_i$ da fronteira, $\eta$ é um vetor normal a superfície, em cada parte $\Gamma_i$ da fronteira. Entende-se assim que há variação de densidade de poluente na fronteira, Santos (2013).

## 2.3. Condições iniciais

O domínio computacional bidimensional $\Omega$ considera inicialmente que não há poluição em nenhum ponto da malha espacial, considera-se ainda que todos os pontos estão sob as mesmas condições de serem poluídos. O modelo matemático 2.1 com as condições de fronteiras e iniciais será escrito por:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial P}{\partial t} = \alpha\left(\dfrac{\partial^2 P}{\Delta x^2} + \dfrac{\partial^2 P}{\Delta y^2}\right) - u\dfrac{\partial P}{\Delta x} - v\dfrac{\partial P}{\Delta y} - \mu P + f \\ \dfrac{\partial P}{\partial \eta}|_{\Gamma_i} = -b_i P \\ P(x,y,0) = P_0(x,y) \\ i = 1, ..., 4. \end{cases} \tag{2.2}$$

## 2.4. Esquemas numéricos

Para resolver computacionalmente o sistema 2.2, discretiza-se o modelo e o domínio visando uma solução por aproximação numérica pelo método de diferenças finitas centrais de segunda ordem para a variável espacial e o método de diferenças finitas de Crank-Nicolson para a variável temporal. As condições de fronteira são do tipo Robin, Santos (2013). A escolha dos métodos devem-se às estabilidades numéricas e margens de erros, que são de ordem quadrática em ambas variáveis.

## 2.5. Discretização do termo temporal

Aqui será apresentado o método de Crank-Nicolson, Prestes e Meyer (2013), de segunda ordem de aproximação para a variável temporal do modelo 2.2 e é numericamente estável, se comparado com outros de menor ordem.

Esse esquema numérico consiste em, primeiramente, particionar o intervalo de tempo $[0, T]$ em $r$ subintervalos regulares de tamanho $\Delta t$, de modo que a partição uniforme resultante dessa discretização seja dada por $\{t_0 = 0, t_1, t_2, ..., t_r = T\}$, sendo $t_{n+1} - t_n = \Delta t$, para $n = 1, .., r-1$.

Prestes e Meyer (2013), dizem que para se obter a densidade do poluente $P$ ao longo do tempo $P^n$ e $P^{n+1}$ no ponto $P_i$, escreve-se:

$$P_i^n = P_i^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{(-\frac{\Delta t}{2})^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + 0(\Delta t)^3 \tag{2.3}$$

$$P_i^{n+1} = P_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{(\frac{\Delta t}{2})^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + 0(\Delta t)^3. \tag{2.4}$$

Fazendo 2.4 - 2.3 obtêm-se: $P_i^{n+1} - P_i^n = \dfrac{\Delta t \partial P}{\partial t}$ que resulta em

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{\Delta t}. \tag{2.5}$$

Agora fazendo 2.4+2.3 tem-se $P_i^{n+1} + P_i^n = 2P_i^{n+\frac{1}{2}}$ que resulta em

$$P_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{P_i^{n+1} + P_i^n}{2}, \tag{2.6}$$

para encontrar a densidade de poluente no instante $t = n + \frac{1}{2}$.

Deste modo, obtém-se a discretização na variável tempo, Prestes e Meyer (2013).

Vale lembrar que:

$\Delta x$ e $\Delta y$ são os tamanhos das malhas computacionais nos eixos das abscissas e das ordenadas, respectivamente, $\Delta t$ será o incremento no tempo, $P_i^n$ aproxima o valor de $P(x_i, y_i)$ no instante $t_n$.

## 2.6. Discretização do termo espacial

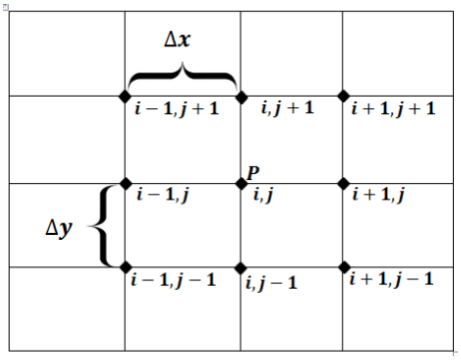



Figura 1: Discretização espacial pelo método de diferenças finitas centrais.

O ponto $P_i$ é o valor aproximado da concentração de $P$ em $(x_i, y_i) \in \Omega$. Uma idéia geometrica do método de diferenças finitas centais é representado na figura 1.

A solução numérica para o modelo 2.2 será pelo métodos de diferenças finitas centrais para variável espacial, Leveque (2007), Santos (2013).

Escrevendo as aproximações de primeira e segunda ordem dos pontos $x_{i+1}$ e $x_{i-1}$ em expansão em série de Taylor, tem-se:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{y''(x_i)(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + r_2(h) \tag{2.7}$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{y''(x_i)(x_{i-1} - x_i)^2}{2} + r_2(h) \tag{2.8}$$

Fazendo 2.7- 2.8 obtém-se:

$$y_i^{'} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \tag{2.9}$$

que equivale a escrever

$$\frac{\partial P}{\partial x} \approx \frac{P_{i_{es}} - P_{i_{di}}}{2\Delta x} \tag{2.10}$$

e

$$\frac{\partial P}{\partial y} \approx \frac{P_{i_{ab}} - P_{i_{ac}}}{2\Delta y}. \tag{2.11}$$

Fazendo 2.7+ 2.8 obtém-se:

$$y_i^{''} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(\Delta x)^2} \tag{2.12}$$

que equivale a escrever

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \approx \frac{P_{i_{es}} - 2P_i + P_{i_{di}}}{\Delta x^2}, \tag{2.13}$$

e

$$\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \approx \frac{P_{i_{ab}} - 2P_i + Pi_{ac}}{\Delta y^2}, \tag{2.14}$$

# 3. Discretização

Nesta seção, encontram-se as discretizações do domínio computacional bidimensional e do modelo matemático 2.2.

O modelo e o domínio foram discretizados visando uma solução por aproximação numérica pelo método de diferenças finitas de Crank-Nicolson no tempo, Prestes e Meyer (2013) e diferenças finitas centrais na dimensão espacial, Santos (2013).

## 3.1. Discretização do domínio

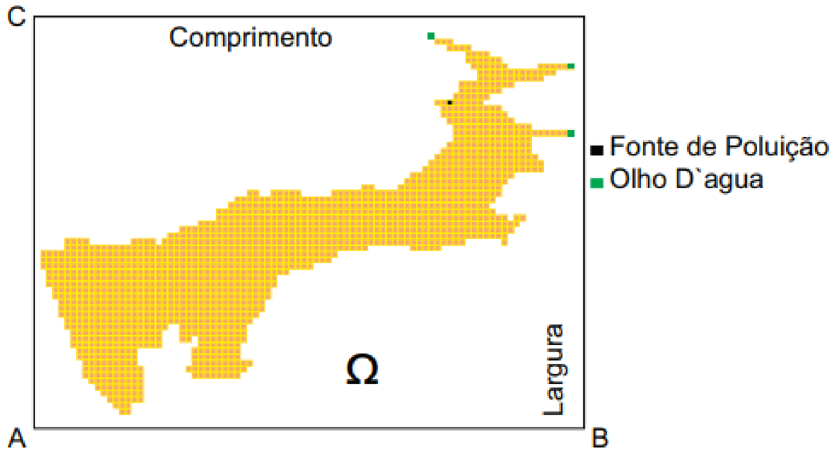



Figura 2: Ilustração do domínio, identificando abscissas e ordenadas.

Considera-se o domínio retangular $\Omega = (a, b) \times (a, c) \subset R^2$ aberto, não vazio e fronteira suficientemente regular que contém em seu interior o Igarapé do Pantanal de aproximadamente 18000 $m^2$, no município de São Sebastião do Uatumã-AM, afetada pela poluição. Considera-se $\Omega$ uma região plana com dimensões 60 $m \times$ 300 $m$.

O processo de discretização do domínio visando o uso do método de diferenças finitas centrais para a variável espacial é feito da seguinte forma: Considere os intervalos $(a, b)$ e $(a, c)$ particionados em $mx$ e $my$ subintervalos. A figura 2 ilustra uma malha para o domínio computacional bidimensional $\Omega$, usando um espaçamento $\Delta x = 0,0125$ e $\Delta y = 0,0125$.

Os nós da malha são enumerados, considerando-se $nnx = mx+1$ e $nny = my + 1$ como sendo os números de nós nos eixos das abscissas e ordenadas, respectivamente.

## 3.2. Discretização do modelo 2.2

Nesta Seção, apresentam-se os processos de discretização nas variáveis temporais e espaciais do modelo 2.2.

A discretização do modelo 2.2 pelo método de diferenças finitas centrais para pontos interiores da malha espacial, consiste em substituir a equação 2.13 no termo de difusão em $x$, 2.14 no termo de difusão em $y$, 2.10 no termo de advecção em $x$ e 2.11 no termo de advecção em $y$ para um tempo $t = n + \frac{1}{2}$ resultando em:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} &= \alpha \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + P_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + \frac{P_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + P_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right] - \\
&- u \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - P_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x} \right] - v \left[ \frac{P_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - P_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y} \right] - \mu P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} \qquad (3.15) \\
&+ f.
\end{aligned}$$

Para a variável temporal a discretização do modelo 2.2 será realizada pelo método de diferenças finitas de Crank-Nicolson. Este processo equivale a substituir em 3.16 as equações 2.5 na variação temporal e 2.6 nos termos $P_i^{n+\frac{1}{2}}$, resultando em:

$$\begin{aligned}
\frac{P_{(i)}^{n+1} - P_{(i)}^{n}}{\Delta t} &= \alpha \left[ \frac{\frac{P_{(i+mx)}^{n+1} + P_{(i+mx)}^{n}}{2} - 2\frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^{n}}{2} + \frac{P_{(i-mx)}^{n+1} + P_{(i-mx)}^{n}}{2}}{\Delta x^2} + \right. \\
&+ \left. \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^{n}}{2} - 2\frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^{n}}{2} + \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^{n}}{2}}{\Delta y^2} \right] \\
&- u \left[ \frac{\frac{P_{(i+mx)}^{n+1} + P_{(i+mx)}^{n}}{2} - \frac{P_{(i-mx)}^{n+1} + P_{(i-mx)}^{n}}{2}}{2\Delta x} \right] \\
&- v \left[ \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^{n}}{2} - \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^{n}}{2}}{2\Delta y} \right] - \mu P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + f. \qquad (3.16)
\end{aligned}$$

Após alguns procedimentos algébricos em 3.16 obtém-se:

$$\begin{aligned}
P_{(i)}^{n+1} - P_{(i)}^{n} &= \Delta t\alpha \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+1} + P_{(i+mx)}^{n} - 2P_{(i)}^{n+1} - 2P_{(i)}^{n} + P_{(i-mx)}^{n+1} + P_{(i-mx)}^{n}}{2\Delta x^2} + \right.\\
&+ \left. \frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^{n} - 2P_{(i)}^{n+1} - 2P_{(i)}^{n} + P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^{n}}{2\Delta y^2} \right] - \\
&- \Delta t u \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+1} + P_{(i+mx)}^{n} - P_{(i-mx)}^{n+1} - P_{(i-mx)}^{n}}{4\Delta x} \right] - \qquad (3.17)\\
&- \Delta t v \left[ \frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^{n} - P_{(i-1)}^{n+1} - P_{(i-1)}^{n}}{4\Delta y} \right] - \Delta t\mu \frac{P_{i}^{n+1} - P_{i}^{n}}{2} + f.
\end{aligned}$$

Agrupando os termos em 3.17 no mesmo passo de tempo de modo conveniente, obtém-se:

$$\begin{aligned}
&P_{(i-1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v}{4\Delta y}\right) + P_{(i)}^{n+1}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t\mu}{2} + 1\right) + \\
&P_{(i-mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u}{4\Delta x}\right) + P_{(i+1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v}{4\Delta y}\right) + P_{(i+mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u}{4\Delta x}\right) \\
&= P_{(i-1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v}{4\Delta y}\right) + P_{(i)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t\mu}{2} + 1\right) + \qquad (3.18)\\
&P_{(i-mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u}{4\Delta x}\right) + P_{(i+1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v}{4\Delta y}\right) + P_{(i+mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u}{4\Delta x}\right) + f.
\end{aligned}$$

Para obter estimativa das derivadas nas fronteiras para a concentração de poluente $P$, considera-se:

1. **Fronteira horizontal superior**

   Nesse caso, $\dfrac{\partial P}{\partial \eta} = \dfrac{\partial P}{\partial y}$. Daí, considerando $\partial_y \notin \Omega$, segue que $\dfrac{\partial P}{\partial \eta} = -b_1\dfrac{P}{\alpha}$.

   Santos (2013) garante que as aproximações para as derivadas de primeira e segunda ordem são respectivamente:

$$P_{(y\notin\Omega)} = P_{(i-1)}^{n} - 2\Delta y b_1 \frac{P_{(i)}^{n}}{\alpha}. \qquad (3.19)$$

$$\frac{2P_{(i-1)}^{n} - 2(1 + \frac{\Delta y b_1}{\alpha})P_{(i)}^{n}}{\Delta y^2}. \qquad (3.20)$$

Substituindo 3.19 e 3.20 em 3.17 e desenvolvendo o mesmo procedimento de agrupamento feito em 3.18, obtém-se:

$$
\begin{aligned}
&P^{n+1}_{(i-mx)}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+\\
&+P^{n+1}_{(i)}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}\right)+\\
&+P^{n+1}_{(i+mx)}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+P^{n+1}_{(i-1)}\left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}\right)=\\
&=P^{n}_{(i-mx)}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+\\
&+P^{n}_{(i)}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}\right)+\\
&+P^{n}_{(i+mx)}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+P^{n}_{(i-1)}\left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}\right).
\end{aligned}
$$

2. **Fronteira horizontal inferior**

Os tratamentos dados as fronteiras horizontal inferior, vertical à esquerda e vertical à direita são análogos aos realizados na horizontal superior. Portanto, os procedimentos numéricos serão omitidos e apresentados apenas os resultados dos agrupamentos.

$$
\begin{aligned}
&P^{n+1}_{(i-mx)}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+\\
&+P^{n+1}_{(i)}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}+\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}\right)+\\
&+P^{n+1}_{(i+mx)}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+P^{n+1}_{(i+1)}\left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}\right)=\\
&=P^{n}_{(i-mx)}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+\\
&+P^{n}_{(i)}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}\right)+\\
&+P^{n}_{(i+mx)}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta tu}{4\Delta x}\right)+P^{n}_{(i+1)}\left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}\right).
\end{aligned}
$$

3. **Fronteira vertical à esquerda**

$$
\begin{aligned}
&P_{(i-1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2}+\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right)+\\
&+P_{(i+mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+P_{(i+1)}^{n+1}\left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}+\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)=\\
&=P_{(i-1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{2\Delta y^2}-\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right)+\\
&+P_{(i+mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+P_{(i+1)}^{n}\left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}-\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right).
\end{aligned}
$$

4. **Fronteira vertical à direita**

$$
\begin{aligned}
&+P_{(i+1)}^{n+1}\left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}+\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right)\\
&+P_{(i-1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)+P_{(i-mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)=\\
&=P_{(i+1)}^{n}\left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2}-\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right)+\\
&+P_{(i-1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta tv}{4\Delta y}\right)-P_{1(i-mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right).
\end{aligned}
$$

5. **Fronteira no canto superior à esquerda**

   Aqui, serão feitas combinações das soluções das fronteiras horizontal superior e vertical à esquerda simultâneas.

$$
\begin{aligned}
&P_{(i-1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i+mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}+\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}+\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right)=\\
&=P_{(i-1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i+mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&+P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}-\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right).
\end{aligned}
$$

6. **Fronteira no canto superior à direita**

As combinações das soluções aqui envolvem as fronteiras horizontal superior e vertical à direita.

$$
\begin{aligned}
&P_{(i-1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i-mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}+\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}+\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right)=\\
&=P_{(i-1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i-mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_1\Delta tv}{2\alpha}-\frac{b_1\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right).
\end{aligned}
$$

7. **Fronteira no canto inferior à esquerda**

Aqui consideram-se as fronteiras horizontal inferior e vertical à esquerda.

$$
\begin{aligned}
&P_{(i+1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i+mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}+\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}+\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right)=\\
&=P_{(i+1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i+mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_3\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}-\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_3\Delta tu}{2\alpha}\right).
\end{aligned}
$$

8. **Fronteira no canto inferior à direita**

As combinações aqui consideram as fronteiras hotizontal inferior e vertical à direita.

$$
\begin{aligned}
&P_{(i+1)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i-mx)}^{n+1}\left(-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n+1}\left(1+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}+\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}+\frac{\Delta t\mu}{2}+\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}+\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}+\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}+\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right)=\\
&=P_{(i+1)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}\right)+P_{(i-mx)}^{n}\left(\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}\right)+\\
&P_{(i)}^{n}\left(1-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta x^2}-\frac{\Delta t\alpha}{\Delta y^2}-\frac{\Delta t\mu}{2}-\frac{b_4\Delta t}{\Delta x}-\frac{b_2\Delta tv}{2\alpha}-\frac{b_2\Delta t}{\Delta y}-\frac{b_4\Delta tu}{2\alpha}\right).
\end{aligned}
$$

# 4. Resultados

Tabela 1: Valores dos parâmetros usado nas simulação computacionais

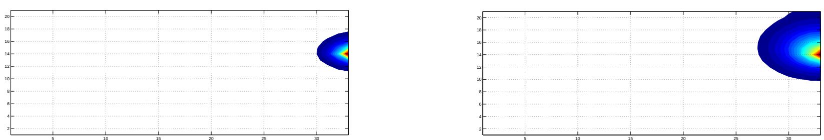
| Parâmetro | Valor | Unidade de medidas |
|---|---|---|
| $\alpha$ | $0.125e-3$ | área/tempo |
| $u$ | $-0.19e-2$ | distância/tempo |
| $v$ | $0.09e-2$ | distância/tempo |
| $\mu$ | $0.25e-8$ | $h^{-1}$ |
| $dt$ | $0.1$ | Número real |
| $\Delta x$ | $0.125$ | Número real |
| $\Delta y$ | $0.125$ | Número real |

Nesta seção, apresentam-se os resultados numéricos das simulações computacionais do modelo 2.2 para a concentração de poluente em cada ponto da malha computacional bidimensional.

Os valores dos parâmetros apresentados na Tabela 1, foram obtidos baseados em Prestes e Meyer (2013) e utilizados nas simulações computacionais.

## 4.1. Resultados: dinâmica temporal

A sequência de figuras 3(a), 3(b) e 4 descrevem, a partir das condições iniciais, a dinâmica temporal de $P$ conforme descritos pelo modelo 2.2.



(a) 50 dias (b) 150 dias

Figura 3: Resultados numéricos computacionais das dinâmicas temporais de $P$, $\Delta t = 0,1$, $T = 50$ dias em 3(a) e $T = 150$ dias em 3(a).

A figura 3(a) mostra os efeitos dos fenômenos considerados no modelo 2.2, descrevendo a dinâmica temporal do poluente $P$ considerado na simulação no domínio computacional bidimencional $\Omega$, em um tempo $T = 50$ dias.

Pode-se observar o espalhamento natural de $P$ em parte do domínio próximo a fonte poluidora $f$, onde é possível observar uma região do domínio em que a concentração de $P$ é menor que em outra.

Cores próximas do azul indicam menor concentração do poluente e próximo ao vermelho, maior concentração do poluente. Isso é evidência dos efeitos da difusão e da advecção, provocando a contaminação no meio aquático.

A figura 3(b) exibe a dinâmica temporal do puliente $P$, considerado na simulação no domínio computacional bidimencional $\Omega$, em um tempo $T = 150$ dias. Pode-se notar que houve um aumento da mancha de poluente quando comparado com a figura 3(a).

Nota-se, nesse resultado, os efeitos mais evidentes dos fenômenos difusivos e advectivos, provocando a dispersão do poluente pelo domínio computacional bidimencional, elevando o índice de contaminação no meio aquático.

A figura 4 descreve o comportamento temporal do poluente $P$, considerado na simulação no domínio computacional bidimencional $\Omega$, em um tempo $T = 500$ dias.

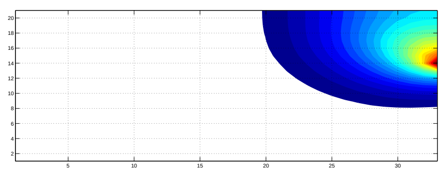


Figura 4: Resultados numéricos computacionais das dinâmicas temporais de $P$, $\Delta t = 0,1$, $T = 500$ dias.

Pode-se notar que houve um aumento significativo da mancha de poluente quando comparado com as figuras 3(a) e 3(b).

Aqui é possível observar uma grande região do domínio computacional bidimensional $\Omega$ afetada pelo poluente $P$. Esse crescimento da mancha de poluição se deve aos fenômenos considerados no modelo matemático 2.2, como a fonte poluidora $f$ e os fenômenos difusivos-advectivos.

Essa alta concentração do poluente só não é maior ao longo tempo no domínio, devido à influência dos fenômenos de volatização e lixiviação representado pelo parâmetro de decaimento $\mu$ no modelo 2.2.

Em síntese, nesse conjunto de simulações apresentados nas figuras 3(a), 3(b) e 4, mostram dispersão do poluente $P$, em grande parte do domínio computacional bidimencional $\Omega$, definindo uma região com alta concentração de poluição próximo a fonte poluidora $f$ e com menor concnetração a medida que se afasta de $f$.

Na figura 4, fica mais evidente os efeitos das condições de contorno, em que mostra a absorção de parte do poluente pela margem do Igarapé.

O tempo em que a fonte $f$ insere poluente no meio aquático pode gerar prejuízos a biodiversidade e ao meio ambiente, e isso pode ser um fator determinante na estrutura e composição futura do ecossistema Gustafson et al. (2004).

Os resultados mostram ainda que, nas Figuras 3(a), 3(b) e 4 à medida que o tempo passa a mancha de poluente aumenta na região e que direção de disperção do poluente é sempre a mesma, pois isso é uma evidência da influência do fenômeno advectivo que considera a direção predominante do vento nessa região.

## 4.2. Resultados: dinâmica espacial

A figura 5 mostra a dinâmica espacial do poluente $P$, considerando os efeitos de todos os fenômenos representados no modelo matemático 2.2. Observa-se claramente seu espalhamento em uma grande área do domínio computacional bidimencional $\Omega$, evidenciando os efeitos difusivo e advectivo. Porém, existem diferentes regiões do domínio em que o poluente apresenta concentrações distintas, devido ao distanciamento da fonte poluidora, pois cores próximas do azul indicam menor concentração do poluente e próximo ao vermelho, maior concentração do poluente, dessa forma, tem-se que quando mais próximo da fonte poluidora $f$ maior a concentração e quanto mais distante de $f$ menor a concentração.

Observa-se que nas fronteiras existem uma variação de $P$, isso já era esperado, devido aos fenômeno de volatização e lixiviação considerados nas condições de contorno ultilizada na modelagem.

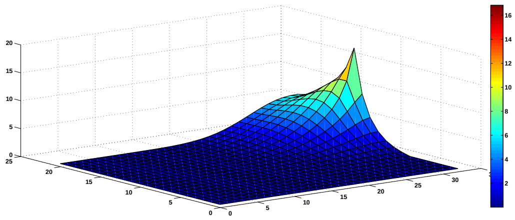



Figura 5: Resultados numéricos computacionais da dinâmica temporal de $P$, com $\Delta t = 0,1$.

## 5 Conclusões

Há evidências de resultados extremamente prejudiciais à vida e à biodiversidade a curto, médio e longo prazos, decorrentes de uma larga gama de efeitos de impactos ambientais. Dentre eles, as poluições em meios aquáticos, afetam de modo irreversível o delicado e instável equilíbrio do convívio de espécies que se inter-relacionam ambientalmente.

Neste trabalho, um modelo matemático linear descrito por uma equação diferencial parcial foi desenvolvido com o principal objetivo de descrever qualitativa e quantitativamente a dispersão de um poluente no Igarapé do Pantanal, elucidando a futura condições aquáticas e o tempo de propagação de $P$ na referida região.

Nas simulações apresentadas nas figuras 3(a), 3(b), 4 e 5, os resultados obtidos mostraram-se de acordo com as expectativas para os fenomênos considerados no modelo 2.2, sendo que o comportamento do processo de dispersão são coerentes com o que ocorre em situações reais no Igarapé do Pantanal em São Sebastião do Uatumã-AM.

Pode-se inferir que, com base nas simulações apresentadas, seria conveniente que a fonte poluidora $f$ fosse submetida a um tratamento adequado ou excluída do cenário, a fim de se obter uma redução considerável no acúmulo de material impactante no Igarapé do Pantanal e consequentemente no Rio Uatumã.

O modelo foi analisado matematicamente e resolvido numericamente. A partir dos resultados obtidos das simulações numéricas computacionais, concluí-se o seguinte:

O modelo aqui apresentado pode contribuir para tornar mais eficientes as estratégias de combate à dispersão de materiais impactantes em corpos d'água.

O aumento da difusão provoca grande espalhamento do poluente no meio aquático;

O fenômeno advectivo é um fator determinante na direção e velocidade em que de propaga a poluição;

Os fenômenos de volatização e lixiviação considerados no decaimento contribui para amenizar a concentração de poluente.

## Referências

Batschelet, E. (1978). *Introdução à matemática para biocientistas.* Interciência; EDUSP, S. Paulo.

Campos, G. (2019). Modelos pioneiros com dinâmica populacional: uma breve análise. TCC Matemática - UFSC, Disponível em `https://repositorio.ufsc.br/bitstream/handle/123456789/203170/TCC%20Geraldo%20Campos.pdf?sequence=1` Acesso em: 10/10/2022.

Diniz, G. L. (1994). A mudança no habitat de populações de peixes: de rio a represa-o modelo matemático. Dissertação de Mestrado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.

Gustafson, D. J., Gibson, D. J., e Nickrent, D. L. (2004). Competitive relationships of andropogon gerardii (big bluestem) from remnant and restored native populations and select cultivated varieties. *Functional Ecology*, 18(3):451–457.

Leveque, R. (2007). *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems.* SIAM, Philadelphia.

Malthus, T. R. (2012). *Ensaio sobre o princípio da população.* Pub. Europa América, S. Paulo.

Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16. North Holland.

Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*, volume 1. Springer.

Prestes, M. F. B. e Meyer, J. F. C. A. (2013). Dispersão de material impactante em meio aquático: Modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional de um estudo de caso. *Revista de Matemática*, 2(1).

Santos, C. F. L. (2013). Modelagem matemática do aumento de densidade de vegetação na amazônia e dinâmica populacional com competição intra e interespecífica. Dissertação de Mestrado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.

Souza, L. R. (2018). Modelos matemáticos aplicados a restauração ecológica: caracterização, avaliação e valoração dos serviços ecossistêmicos promovidos pela avifauna. Dissertação de Mestrado, Engenharia Ambiental–UFPR, Curitiba/PR.