

Método de Diferencias Finitas para a modelagem e simulação da dispersão de poluentes em meios aquáticos

D. Cajas Guaca¹, J. C. Rubianes Silva²
J. F. C. A. Meyer³

DMA, IMECC – UNICAMP, 13,083-970, Campinas/SP.

Resumo. Esta pesquisa estuda mediante a modelagem matemática e simulação computacional, a dispersão de poluentes em meios aquáticos. O modelo envolve a equação diferencial parcial com termos de difusão e advecção, cuja solução aproximada será obtida numericamente usando o método de diferenças finitas de segunda ordem e o método de Crank-Nicolson. Apresentamos uma aplicação em um domínio real na Baía de Buenaventura no sudoeste do Pacífico Colombiano, considerando as principais características do domínio para a modelagem, com suas respectivas condições de fronteira do entorno natural, considerando absorção de poluente nas margens. Os Resultados serão apresentados em simulações computacionais.

Palavras-chave: *Equação de Difusão-Advecção, Método de Crank-Nicolson, Impacto Ambiental, Baía de Buenaventura.*

1 Introdução

A modelagem matemática para fenômenos reais, apresenta sistemas excessivamente complexos, difíceis de observar, se os consideramos com todos os seus detalhes. *O método científico analítico, iniciado com Galileu (1564-1642), consiste exatamente em restringir e isolar o campo de estudo apropriadamente*

¹denniis1007@gmail.com

²rubianes_silva@yahoo.es

³joni@ime.unicamp.br

de tal modo que o problema seja tratável e ao mesmo tempo, manter sua relevância, (ver: Bassanezi e Ferreira, 1988).

As aplicações em domínios reais, não podem ser representadas de maneira exata por uma equação matemática ou um sistema de equações, no entanto se escolhem as variáveis essenciais do fenômeno, de tal forma que a formalização matemática possa ser trabalhada, desenvolvida e absorvida mediante a interpretação dos resultados que podem ser traduzidos na linguagem do problema original, (ver: Bassanezi e Ferreira, 1988).

Segundo Escobar (2003), cerca de 70 a 75% da poluição marinha global é o resultado das atividades humanas sobre a terra, 90% dos contaminantes são transportados pelos rios até o mar. Além disso, entre 70 e 80% da população mundial (cerca de 7.200 milhões de pessoas, segundo a Organização das Nações Unidas (ONU)) está localizada nos litorais ou perto deles; uma proporção significativa dos resíduos produzidos especialmente em áreas urbanas, é despejado diretamente no oceano.

Assim, neste trabalho escolhemos uma aplicação num domínio real, na Baía que leva o nome da cidade portuária de Buenaventura localizada no sudoeste do litoral Pacífico Colombiano, entre os 77° 16' de longitude oeste e os 3° 56' de latitude norte ver Figura 1*. Na literatura existem pesquisas que mostram um nível de poluição alto por despejo de esgoto, assim como problemas de poluição por resíduos sólidos e mercúrio, (ver: Aguas et al., 2014).

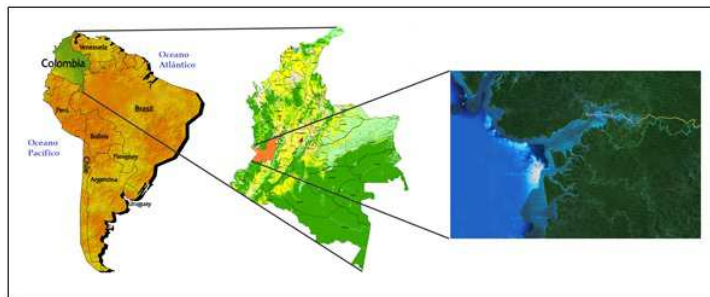


Figura 1: Localização geográfica e imagem de satélite da Baía de Buenaventura, no litoral pacífico colombiano. Fontes: IGAC e Google Earth.

*IGAC, Instituto Geográfico Agustín Codazzi, Colômbia.

2 Metodologia

Vamos considerar o modelo clássico que envolve a equação de Difusão-Advecção (ver: Edelstein, 1987 e Murray, 2002), para representar matematicamente o problema de dispersão de poluentes em meios aquáticos. Serão feitas discretizações do domínio para o tratamento numérico do modelo e as implementações serão feitas em ambiente Matlab.

2.1 Modelo

O domínio de estudo que representa a superfície das águas da baía de Buenaventura é representado por $\Omega \in \mathbb{R}^2$ e no tempo considera-se $I = (0, T]$, onde T é o tempo total de simulação.

No modelo é considerada a dispersão de poluentes pela ação conjunta do fluxo difusivo e o fluxo advectivo, o decaimento do poluente proporcional à concentração e as fontes poluidoras. Considera-se como $P(x_i, y_i, t_n)$, a função de concentração de poluente, na variável espacial $(x_i, y_i) \in \Omega$ no tempo $t \in I$, por simplicidade usa-se a notação P .

De forma geral o modelo está dado por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \underbrace{\alpha \Delta P}_{\text{difusão}} - \underbrace{\mathbb{W} \cdot \nabla P}_{\text{advecção}} - \underbrace{\sigma P}_{\text{decaimento}} + \underbrace{f}_{\text{fonte}}$$

onde:

- α , é o coeficiente de dispersão do poluente, (constante).
- $\mathbb{W} = (w_1, w_2)$, é o campo de velocidades do vento.
- σ , é a taxa de decaimento do poluente.
- f , a fonte poluidora.

2.1.1 Condições Iniciais e de Fronteira

As informações que descrevem o estado inicial do meio de estudo, se conhecem como condições iniciais, e as descrições da forma de interação do meio com o exterior físico através de sua fronteira são denominadas condições de fronteira, ou condições de contorno. Este tipo de informações influirão decisivamente nos resultados.

Segundo as características do domínio escolhido, usaremos as condições de contorno de Robin. A fronteira do domínio Ω será denotada por $\partial\Omega$.

As condições de Robin são consideradas condições de fronteira mista, esta pode ser vista como a combinação linear das condições de Dirichlet e Neumann (Ver: Cajas Guaca, 2015). Para o nosso estudo, será expressada pela combinação linear dos valores da função P e os valores de sua derivada na fronteira,

$$\alpha \frac{\partial P}{\partial \eta}(x, y, t) \Big|_{\Gamma} = -kP(x, y, t), \quad (2.1)$$

onde $(x, y) \in \Gamma \subset \partial\Omega$, $t \in (0, T]$ e k representa o coeficiente de proporcionalidade da perda de poluente na fronteira Γ .

As condições de fronteira de Von Neumann homogêneo, obtém-se quando $k = 0$, assim,

$$\frac{\partial P}{\partial \eta}(x, y, t) \Big|_{\Gamma} = 0 \quad (2.2)$$

Consideramos o estado inicial do domínio escolhido, livre de poluentes ou seja a condição inicial, $P(x, y, 0) = 0$.

Assim, para o nosso domínio de estudo, o modelo para a dispersão de poluente com condição inicial e condições de fronteira de Robin, torna-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial P}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) + \mathbb{W} \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial x}, \frac{\partial P}{\partial y} \right) + \sigma P = f \\ -\alpha \frac{\partial P(x, y, t)}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma} = kP(x, y, t) \quad (x, y) \in \Gamma \subseteq \partial\Omega \\ P(x, y, 0) = 0 \quad (x, y) \in \Omega. \end{array} \right. \quad (2.3)$$

3 Tratamento Numérico do Modelo

Dada a complexidade da equação diferencial parcial (2.3) para obter uma solução analítica, vamos tratar o modelo descrito por esta equação numericamente, o tratamento consiste na discretização do domínio e das derivadas envolvidas.

3.1 Discretização do Domínio

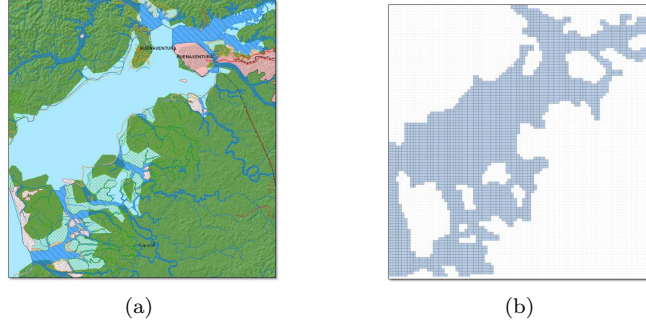


Figura 2: (a) Domínio de estudo: Baía de Buenaventura. (b) Malha do domínio.

Dadas as condições naturais, o domínio tem fronteiras bastante irregulares ver Figura 2(a), para analisar o processo, dividimos o meio com um reticulado discreto, de tal maneira que possamos extrair da melhor forma possível a geometria original do domínio como a Figura 2(b).

Sem perda de ambiguidade, chamamos de Ω a representação geométrica discreta do conjunto de nós (x_i, y_i) do reticulado, que correspondem à superfície da água. A discretização gerou 3639 nós, o espaçamento horizontal é dado por Δx e o tamanho do espaçamento vertical é dado por Δy [†].

Dada a geometria da malha adotada na Figura 2(b), no contorno obteve-se oito tipos de fronteira, ver os detalhes em Cajas Guaca (2015).

Com respeito à variável temporal, vamos observar o comportamento da concentração de poluente, num intervalo de tempo I , o qual vamos dividir em N subintervalos de tempo de igual tamanho Δt , onde $\Delta t = T/N$.

3.1.1 Condição de Péclet

Em equações diferenciais com termos advectivos dominantes, as soluções numéricas podem apresentar oscilações, uma tentativa para evitar estas oscilações é estabelecer um critério que forneça uma condição sobre a discretização do domínio. Esta condição é dada pelo "Número de Péclet," este número relaciona a velocidade do fluxo advectivo, o coeficiente do fluxo difusivo e os

[†]Os nós são igualmente espaçados na horizontal como na vertical $\Delta x = \Delta y$, mas as implementações foram feitas para quaisquer $\Delta x, \Delta y$.

parâmetros de malha da discretização espacial $\Delta x, \Delta y$ (ver: Thum, 2012), e é dada por,

$$\frac{w_1 \Delta x}{\alpha} < 2 \quad \text{e} \quad \frac{w_2 \Delta y}{\alpha} < 2. \quad (3.4)$$

3.2 Discretização do Modelo

Nas discretizações do modelo, para a variável espacial utilizaremos o método de Diferenças Finitas de segunda ordem, e para a variável temporal o método de Crank-Nicolson. A idéia básica é utilizar os métodos para transformar a resolução da equação diferencial (2.3) em um sistema de equações algébricas, substituindo as derivadas por diferenças (ver: Ruggiero e Lopes, 1997).

A escolha do método de diferenças finitas centradas para a discretização espacial é justificada por sua maior precisão por ser uma aproximação de segunda ordem e é facilmente executado em computadores.

No Método de Crank-Nicolson para a discretização da variável temporal, usaremos o instante intermediário $t_{n+\Delta t/2} \in (t_n, t_{n+1})$ o qual notaremos por $t_{n+1/2}$,

$$P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{P_{i,j}^{n+1} + P_{i,j}^n}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.6)$$

Para a discretização do termo difusivo, usamos;

$$\frac{\partial^2 P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x^2} = \frac{P_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y^2} = \frac{P_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (3.8)$$

Para a discretização do gradiente, vamos usar a aproximação:

$$\frac{\partial P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} = \frac{P_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} = \frac{P_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y^2) \quad (3.10)$$

Substituindo as equações (3.5) - (3.10), em (2.3), e isolando os termos convenientemente para a aproximação $P_{i,j}^{n+1}$ do lado esquerdo e os termos $P_{i,j}^n$ no lado

direito, obtemos um esquema para a discretização dos pontos interiores.

$$\begin{aligned}
 & P_{i-1,j}^{n+1} \left(\frac{-\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} \right) + P_{i,j-1}^{n+1} \left(\frac{-\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \right) + \\
 & P_{i,j}^{n+1} \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta y^2} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) + P_{i,j+1}^{n+1} \left(\frac{-\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \right) + \\
 & P_{i+1,j}^{n+1} \left(\frac{-\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} \right) = P_{i-1,j}^n \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} \right) + \\
 & P_{i,j-1}^n \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \right) + P_{i,j}^n \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta y^2} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) + \\
 & P_{i,j+1}^n \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \right) + P_{i+1,j}^n \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} \right) + \Delta t f_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}$$

A discretização adotada pelo método de Diferenças Finitas e o método de Crank-Nicolson, nos garantem uma aproximação de segunda ordem no espaço e no tempo $O(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta t^2)$, além disso o método de Crank-Nicolson é incondicionalmente estável e o método de Diferenças Finitas deve satisfazer a condição de Péclet (3.4) para manter a estabilidade.

Desta discretização obtemos um sistema linear da forma

$$A P^{n+1} = B P^n + c, \tag{3.11}$$

onde o termo independente $c = (c_{i,j})$ é dado por $c_{i,j} = \Delta t f_{i,j}^{n+1/2}$ e as matrizes são dadas por:

$$A = a(i, j) \text{ com } a(i, j) = a_{i,j} \text{ e}$$

$$B = b(i, j) \text{ com } b(i, j) = b_{i,j}$$

onde M é o número total de nós e $1 \leq i, j \leq M$.

Vale ressaltar que as estruturas destas matrizes do sistema linear (3.11), obtido pelo método de Diferenças Finitas e o método de Crank-Nicolson, são bem esparsas tendo em cada linha no máximo cinco entradas não nulas.

As entradas não nulas são:

$$\begin{aligned}
 a_{i-1,i} &= -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} & b_{i-1,j} &= \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} \\
 a_{i,j-1} &= -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} & b_{i,j-1} &= \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \\
 a_{i,j} &= 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta y^2} + \frac{\sigma\Delta t}{2} & b_{i,j} &= 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta y^2} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \\
 a_{i,j+1} &= -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} & b_{i,j+1} &= \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w_2\Delta t}{4\Delta y} \\
 a_{i+1,j} &= -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x} & b_{i+1,j} &= \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{w_1\Delta t}{4\Delta x}
 \end{aligned}$$

A discretização das condições de fronteira são feitas de maneira similar.

4 Simulações

Apresentamos alguns cenários de simulações resultantes da implementação computacional do modelo, os algoritmos foram programados no ambiente Matlab. A Baía de Buenaventura apresenta várias possíveis fontes de emissão de poluentes, das quais algumas destas são difusas, assim chamadas por não terem um ponto de lançamento específico ou por não advirem de um ponto preciso de geração. Nas simulações, inicialmente vamos levar em conta a fonte pontual de poluição registrada na ponte El Pinal.

4.1 Parâmetros

Pode-se encontrar uma ampla literatura nos últimos 20 anos por vários especialistas em diferentes áreas, que abordam os problemas ambientais da Baía de Buenaventura, mesmo assim nem sempre se consegue estudos específicos sobre os parâmetros, nem dados na literatura nem com as entidades que possam estar envolvidas.

Assim, para o desenvolvimento do modelo matemático e para as simulações, alguns parâmetros foram tomados de pesquisas relacionadas (ver: Cajas Guaca, 2015), e outros parâmetros foram estimados tentando da melhor forma possível manter as características das condições ambientais reais.

Consideramos 3 tipos de fronteiras do domínio real, fronteiras com solos de areia, rocha e manguezal, cujos coeficientes de absorção de poluentes são k_1 , k_2 e k_3 , respectivamente.

Tabela 1: Parâmetros usados nas simulações.

Parâmetros	Valor	Parâmetros	Valor
Δx	0,18 km	k_1	$1,5 \times 10^{-4} \text{ uc/h}$
Δy	0,18 km	k_2	$2,5 \times 10^{-5} \text{ uc/h}$
Δt	0,06 h	k_3	0,0 uc/h
α	0,046 km ² /s	σ	0,00001 h ⁻¹
H	19,8 km	L	17,47 km

H e L representam o comprimento e largura do domínio, respectivamente, e denotamos as unidades de concentração de poluente por *uc*. As simulações foram feitas para um tempo total de 96 horas com 1.600 iterações.

Na Tabela 1, temos os parâmetros da discretização espacial os quais foram os mesmos para todos os cenários.

Para as simulações foi considerada uma fonte pontual localizada na ponte El Pinal, os dados das velocidades dos ventos predominantes (tomados no aeroporto da cidade de Buenaventura) foram fornecidos pelo Programa de Meteorologia Aeronáutica do IDEAM. Segundo a norma internacional estabelecida pela OMM[‡], os ventos são tomados a 10 metros de altura. Denotaremos por V^* , o vento a 10 m de altura, e denotaremos por V o vetor de velocidade superficial do vento, o qual é dado pela equação de Ekman (ver: Oliveira, 2003),

$$V = 0.03 * V^* \tag{4.12}$$

que expressa o vento superficial V como sendo 3% do vento V^* .

4.2 Cenário 1: Vento Sudoeste

Neste cenário, estudamos a dispersão do poluente na direção do vento predominante, o vento sudoeste com uma velocidade média superficial de 0,67 km/h.

[‡]Organização Meteorológica Mundial.

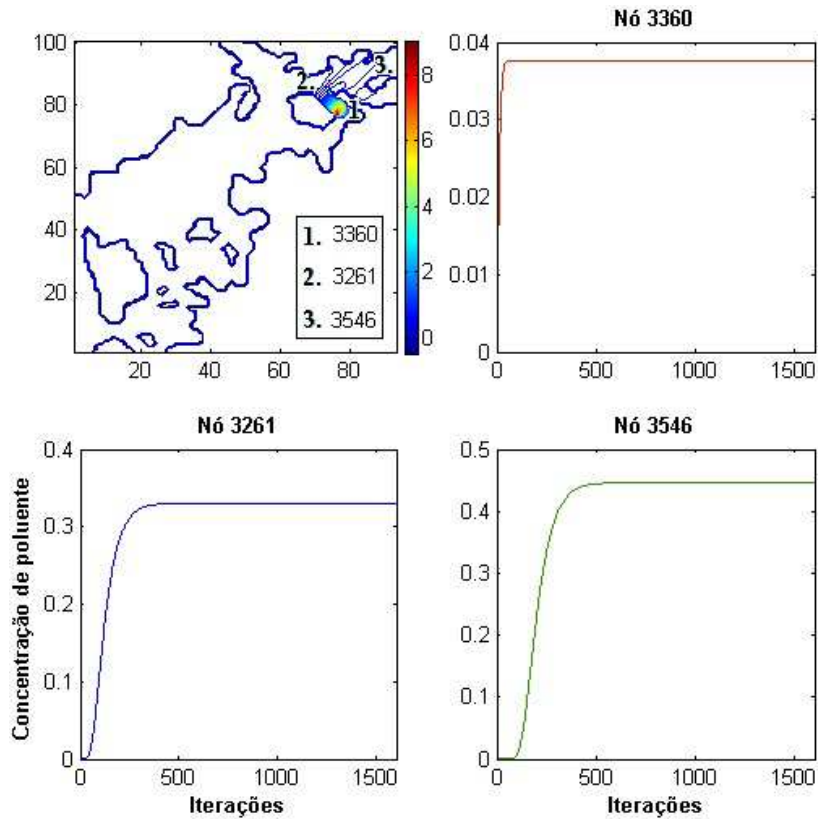


Figura 3: Comportamento evolutivo pontual da concentração de poluente, vento sudoeste.

Na Figura 3, o primeiro gráfico mostra a dispersão do poluente e a localização de três nós do domínio, enquanto os demais gráficos exibem o comportamento ao longo do tempo destes nós.

Para o período de tempo e vento considerados nesta simulação, o máximo de concentração de poluente foi de $9,17 \text{ uc}$. Para a análise do comportamento ao longo do tempo, foram escolhidos os nós 3261, 3360 e 3546 por serem eles atingidos pelo poluente.

Para o comportamento evolutivo pontual do nó 3360, localizado a 180 metros à direita da fonte, observa-se que este atinge o nível assintótico rapidamente nas primeiras iterações com uma concentração menor a $0,04 \text{ uc}$. Observe-se que embora o nó 3360 esteja localizado perto da fonte, sua baixa

concentração deve-se à geomorfologia da baía e a direção do vento; os nós 3261 e 3546 atingiram um nível assintótico aproximadamente após de 24 horas e 30 horas respectivamente.

4.3 Cenário 2: Vento leste

Neste cenário estudamos a dispersão do poluente com a direção do vento este, o qual tem uma velocidade média superficial de $0,21 \text{ km/h}$.

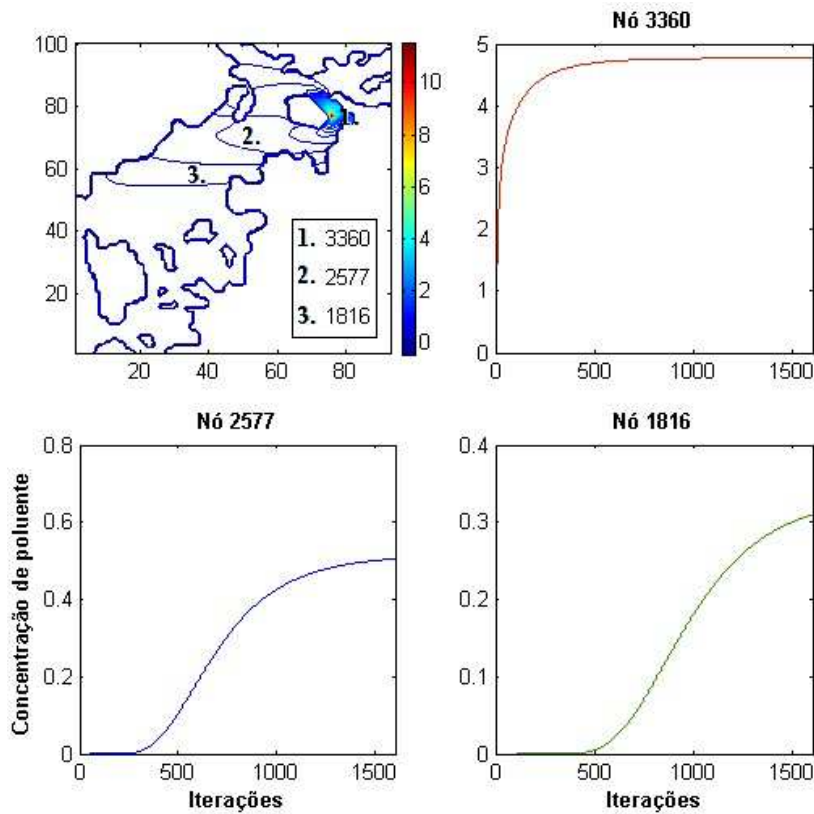


Figura 4: Comportamento evolutivo pontual da concentração de poluente, vento leste.

Para o período de tempo considerado nesta simulação, a maior concentração de poluente foi $11,68 \text{ uc}$. No primeiro gráfico da Figura 4, pode-se ver a localização dos nós 3360, 2527 e 1813.

No gráfico do nó 3360, perto da fonte, observa-se que o nível assintótico é atingido aproximadamente após 60 horas com uma concentração de poluente menor a 5 *uc*.

No gráfico do nó 2527, onde não há concentração inicial do poluente, percebe-se sua chegada nesta região após de 15 horas. No gráfico do nó 1813, mas distante da região onde se encontra a fonte, este foi atingido pelo poluente após de 30 horas, com concentrações menores em comparação com o máximo atingido.

Segundo nossas simulações na Figura 4, o vento este permite um maior espalhamento do poluente comparado com o cenário 1.

5 Conclusões

Conseguimos descrever e visualizar, mediante a modelagem matemática e as simulações, a dispersão de poluentes na Baía de Buenaventura. As representações gráficas dos resultados são uma ferramenta de fácil leitura e interpretação que pode ser de interesse para profissionais de áreas afins.

O modelo adotado proporciona uma boa ferramenta computacional para a simulação de fenômenos ecológicos e ambientais, que na prática, podem contribuir para o estudo, diagnóstico e avaliação de efeitos de impacto ambiental, para assim as entidades governamentais tentarem implementar mecanismos de preservação e de proteção do meio ambiente.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à Capes e ao CNPq pela ajuda financeira (processo 140448/2013-6).

Referências

Aguas, V., Sánchez, L., Betancour, J., Quintero, M., Moreno, Y., Santana, C., Cuadrado, I., Ibarra, K., Rios, M., Obando, P., e D, S. (2014). *Diagnóstico y evaluación de la calidad de las aguas marinas y costeras del Caribe y Pacífico colombiano. Diagnóstico Nacional y Regional*, volume 4. Serie de publicaciones periódicas del INVEMAR, Santa Marta.

- Bassanezi, R. C. e Ferreira, W. C. (1988). *Equações diferenciais com aplicações*. HARBRA, SP.
- Cajas Guaca, D. (2015). Impacto ambiental em meios aquáticos: Modelagem, aproximação e simulação de um estudo na Baía de Buenaventura-Colômbia. Master's thesis, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP.
- Escobar, J. (2003). *La contaminación de los ríos y sus efectos en las áreas costeras y el mar*, volume 50. United Nations Publications.
- Oliveira, R. F. (2003). *O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: modelagem, análise numérica e simulações*. PhD thesis, IMECC-UNICAMP.
- Ruggiero, M. A. G. e Lopes, V. L. D. R. (1997). *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. Makron Books do Brasil, S.Pualo.
- Thum, P. (2012). *Algebraic Multigrid for the Multi-Ion Transport and Reaction Model. A Physics-Aware Approach*. Logos, Berlin.

