

Esquema Scharfetter-Gummel e sua aplicação na modelagem da dispersão de agrotóxicos no Lago Titicaca

J. C. Rubianes Silva¹, D. Cajas Guaca², J. F. C. A. Meyer³,
DMA, IMECC – UNICAMP, 13.083-970, Campinas/SP.

J. A. I. Rubianes Silva⁴
DCA, FEEC – UNICAMP, 13.083-852, Campinas/SP.

Resumo. Oscilações nas soluções obtidas pelos métodos numéricos ocorrem quando o termo advectivo é muito superior ao difusivo ou quando condições de fronteira inadequadas geram mudanças bruscas na solução. Neste artigo, utiliza-se o Esquema Scharfetter-Gummel que aumenta a estabilidade dos métodos de diferenças finitas, inserindo uma difusão artificial e dando uma aproximação de segunda ordem. O domínio das simulações será o Lago Titicaca, considerando a Equação de Difusão-Advecção para modelar problemas de agrotóxicos.

Palavras-chave: *Equação de Difusão-Advecção, Métodos Upwind, Dispersão de Poluentes, Simulação Computacional.*

1. Introdução

Para a modelagem de problemas de dispersão de poluentes é usada a equação clássica de Difusão-Advecção, e o método de diferenças finitas é um dos mais usados para obter a solução numérica deste tipo de problemas, por sua simplicidade, facilidade de implementação e sua eficiência para a resolução de EDP's.

¹rubianes.silva@yahoo.es

²denniis1007@gmail.com

³joni@ime.unicamp.br

⁴angelivan34@hotmail.com

Problemas de instabilidade numérica, apresentam-se quando o termo advectivo é grande comparado com o termo difusivo, uma possibilidade para evitar as oscilações causadas pela instabilidade é o refinamento da malha, o que aumenta as dimensões do sistema a ser resolvido e que finalmente termina sendo caro computacionalmente. Métodos Upwind são uma boa ferramenta para enfrentar este tipo de problemas, o Esquema Scharfetter-Gummel é um método do tipo Upwind e de segunda ordem, que garante a estabilidade.

Para as simulações numéricas, será usado como domínio de estudo o lago Titicaca, o qual apresenta vários problemas de poluição por esgoto, mercúrio e agrotóxicos.

O Titicaca é o lago navegável mais alto do mundo, a 3.810 metros de altitude, localizado no altiplano da América do Sul, na fronteira do Peru e da Bolívia, o lago tem uma profundidade média de 160 metros e recebe as águas de mais de 25 pequenos rios.

O lago tem uma área de 8.562 quilômetros quadrados, sendo 3.790 em território boliviano e 4.772 no território peruano. Suas águas são um recurso importante para cerca de 400 mil pessoas que vivem da pesca, dos cultivos e da vegetação que é usada como alimento do gado, e para a ancestral técnica de construção de balsas de totora.



Figura 1: Lago Titicaca. Fonte: Google Earth.

2. Descrição do problema

As principais atividades das famílias das diferentes comunidades são a agricultura e pecuária; embora a principal fonte de alimento da população é a batata cultivada sob sequeiro, também cultiva-se quinoa, cevada, feijão, ervilha, tremoço, trigo, aveia, triticale e outros. Há problemas de fenômenos climáticos, pois algumas vezes há pouca precipitação, pelo que os habitantes optaram por uma estratégia de produção nas margens do lago.

O Lago Titicaca sustentou as populações por milhares de anos, fornecendo água limpa e peixes. Mas agora está ameaçado pelo crescimento populacional e o inchaço das cidades, que geram grandes quantidades de esgoto, lixos, resíduos agroindustriais e rejeitos da mineração.

O homem desenvolveu os agroquímicos também denominados pesticidas, praguicidas, etc, com o objetivo de proteger a sua colheita. Estes produtos químicos, ou mistura destes, são destinados ao uso, armazenamento e beneficiamento de produtos agrícolas. Sua aplicação indiscriminada acarreta inúmeros problemas para a saúde dos consumidores e prejuízos ao meio ambiente, contaminando o solo e as águas (Chagas, 2009).

De acordo com (Ferrari, 1986), as terras carregadas pelas águas das chuvas levam para os rios, lagoas e barragens, os resíduos de agrotóxicos, comprometendo a fauna e a flora aquática, além de comprometer as águas captadas com a finalidade de abastecimento.

3 Modelo Matemático

Modelos matemáticos para a dispersão de poluentes em diferentes meios têm sido desenvolvidos e difundidos em várias pesquisas, Diniz e Campos F^o (2010), Prestes et al. (2013), Cajas Guaca (2015), que obtiveram aproximações para a simulação do comportamento evolutivo de poluentes.

Um modelo amplamente utilizado para a dispersão de poluentes é obtido através da equação diferencial parcial de Difusão-Advecção (LeVeque, 2007; Cantrell e Cosner, 2003; Okubo e Levin, 1980), que é de grande importância na modelagem matemática destes problemas. Denotando C a concentração de poluentes provenientes de atividades agrícolas, $C = C(x, y, t)$, $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in J = (0, T] \subset \mathbb{R}$, a equação que descreve tal fenômeno é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha \nabla C) + \operatorname{div}(\nabla C) + \mu C = f, \quad (3.1)$$

onde

- $\alpha(x, y, t)$, representa a difusibilidade do poluente no meio;
- $\nabla = (v_1, v_2)$, representa o campo de velocidades do vento.
- $\mu(x, y, t)$, representa o decaimento do poluente no meio;
- $f(x, y, t)$, representa as fontes de poluentes.

A proposta de aplicação deste modelo, é a simulação computacional do comportamento evolutivo de um material impactante no Lago Titicaca. O uso de agrotóxicos nas plantações é feito em períodos sazonais, então considerando o intervalo do domínio temporal $(0, T]$ contido entre uma época e outra, é razoável admitir $f = 0$.

Considerando as condições de contorno de Neumann homogêneas

$$\left. \frac{\partial C}{\partial \eta}(x, y, t) \right|_{\partial \Omega} = 0, \quad \text{para todo } (x, y) \in \partial \Omega \text{ e } t \in (0, T], \quad (3.2)$$

onde $\partial \Omega$ representa a fronteira do lago, assim o modelo torna-se

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \mu C = f \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y) \\ \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\partial \Omega} = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

A condição de contorno é considerada de Neumann homogênea, pois as margens do lago estão saturadas pelo poluente, o que não permite a absorção (perda de poluente) na fronteira.

3.1 Condição de Péclet

Uma tentativa de evitar as oscilações na solução numérica quando há uma predominância do termo advectivo, é estabelecer um critério que forneça

uma condição sobre a discretização do domínio. Esta condição é dada por um número adimensional que relaciona a velocidade de advecção do fluxo, o coeficiente de difusão e os parâmetros de malha da discretização espacial, esta condição é denominada "Número de Péclet" e é dada por,

$$\mathbb{P}_{ex} = \frac{v_1 \Delta x}{2\alpha} \leq 1 \quad e \quad \mathbb{P}_{ey} = \frac{v_2 \Delta y}{2\alpha} \leq 1. \quad (3.4)$$

Onde Δx e Δy representam os espaçamentos da malha na horizontal e na vertical respectivamente, $\mathbb{V} = (v_1, v_2)$ é o campo de velocidades do vento e α o coeficiente de difusão.

3.2 Esquema Scharfetter-Gummel

No que segue, $C_{i,j}^n = C(x_i, y_j, t_n)$ representa a concentração de poluente no ponto (x_i, y_j) e no instante t_n , e as componentes do campo de velocidades v_1 e v_2 são assumidas positivas (no caso de alguma ser negativa, o tratamento numérico será similar). Consideremos a aproximação da primeira derivada de C em relação a x da seguinte maneira,

$$\frac{\partial C}{\partial x} = (1 - \lambda) \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} + \lambda \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (3.5)$$

tal que $\lambda > 0$. O segundo termo do lado direito, pode ser expresso como

$$\frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{\Delta x} = \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^2}, \quad (3.6)$$

substituindo a equação (3.6) na equação (3.5), obtem-se

$$\frac{\partial C}{\partial x} = (1 - \lambda) \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} + \lambda \left[\frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^2} \right],$$

cancelando termos da equação anterior, obtemos

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} - \lambda \frac{\Delta x}{2} \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^2}. \quad (3.7)$$

De maneira similar, obtemos a aproximação para a primeira derivada em relação a y

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}{2\Delta y} - \lambda \frac{\Delta y}{2} \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{\Delta y^2}. \quad (3.8)$$

Outras aproximações que serão usadas para aproximar o laplaciano, são as diferenças finitas centradas:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i, y_j, t_n) \simeq \frac{C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n}{\Delta x^2}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}(x_i, y_j, t_n) \simeq \frac{C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n}{\Delta y^2}, \quad (3.10)$$

também, para desenvolver a parte temporal, utilizamos o Método de Crank-Nicolson, isto é, usando as aproximações:

$$\frac{\partial C_{i,j}^{n+\Delta t/2}}{\partial y} \simeq \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t}, \quad (3.11)$$

$$C_{i,j}^{n+\Delta t/2} \simeq \frac{C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n}{2}, \quad (3.12)$$

Assim, substituindo as equações (3.7)-(3.12) na equação (3.1), obtemos

$$\begin{aligned} & \left(\frac{-\alpha_{\lambda x} \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{v_1 \Delta t}{4\Delta x} \right) C_{i+1,j}^{n+1} + \left(\frac{-\alpha_{\lambda y} \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v_2 \Delta t}{4\Delta y} \right) C_{i,j+1}^{n+1} + \\ & \quad \left[1 + \frac{\alpha_{\lambda x} \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\alpha_{\lambda y} \Delta t}{\Delta y^2} + \frac{\mu \Delta t}{2} \right] C_{i,j}^{n+1} + \\ & \left(\frac{-\alpha_{\lambda y} \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v_2 \Delta t}{4\Delta y} \right) C_{i,j-1}^{n+1} + \left(\frac{-\alpha_{\lambda x} \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{v_1 \Delta t}{4\Delta x} \right) C_{i-1,j}^{n+1} = \\ & \left(\frac{\alpha_{\lambda x} \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{v_1 \Delta t}{4\Delta x} \right) C_{i+1,j}^n + \left(\frac{\alpha_{\lambda y} \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v_2 \Delta t}{4\Delta y} \right) C_{i,j+1}^n + \\ & \quad \left[1 - \frac{\alpha_{\lambda x} \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{\alpha_{\lambda y} \Delta t}{\Delta y^2} - \frac{\mu \Delta t}{2} \right] C_{i,j}^n + \\ & \left(\frac{\alpha_{\lambda y} \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v_2 \Delta t}{4\Delta y} \right) C_{i,j-1}^n + \left(\frac{\alpha_{\lambda x} \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{v_1 \Delta t}{4\Delta x} \right) C_{i-1,j}^n, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde

$$\alpha_{\lambda x} = \alpha \left(1 + \frac{\lambda v_1 \Delta x}{2\alpha} \right), \quad \alpha_{\lambda y} = \alpha \left(1 + \frac{\lambda v_2 \Delta y}{2\alpha} \right), \quad (3.14)$$

são termos de perturbação, também chamados de difusão artificial.

Assim, a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\alpha_{\lambda x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \alpha_{\lambda y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) + \operatorname{div}(\nabla C) + \mu C = f, \quad (3.15)$$

é a equação diferencial (3.1), mas com uma *difusão artificial* dependente do parâmetro λ , também chamada de equação diferencial perturbada. Uma boa escolha de λ para este esquema, permitirá uma melhor precisão, de tal forma que o erro de discretização seja da ordem de $O(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta t^2)$, (ver: Scharfetter e Gummel, 1969).

3.3 Difusão Artificial

Os termos dados na equação (3.14), podem-se escrever como

$$\alpha_{\lambda x} = \alpha(1 + \lambda \mathbb{P}_{ex}) \quad \text{e} \quad \alpha_{\lambda y} = \alpha(1 + \lambda \mathbb{P}_{ey}),$$

isto significa que o termo artificial, depende diretamente do *número de Péclet* e este por sua vez é dado em termos de Δx e Δy .

Após a obtenção do esquema (3.15), o seguinte passo será encontrar λ , de modo que o resultado obtido numericamente, seja igual ao resultado da solução exacta nos nós da discretização, isto é

$$C_{num}(x_i, y_j, t_n) = C_{exata}(x_i, y_j, t_n),$$

C_{num} e C_{exata} representam, a solução numérica e a solução analítica respectivamente da equação diferencial (3.3). Em (Quarteroni e Saleri, 2000; Rosas, 2005), para obter λ , é usada a seguinte relação:

$$\lambda t = t - 1 + B(2t) \quad (3.16)$$

tal que $B(t)$ é a equação de Bernoulli, definida como $B(t) = \frac{t}{e^t - 1}$ para todo $t \neq 0$ e $B(0) = 1$. Substituindo $t = \mathbb{P}_{ex}$ na equação (3.16) obtemos

$$\lambda \mathbb{P}_{ex} = \mathbb{P}_{ex} - 1 + \frac{2\mathbb{P}_{ex}}{e^{2\mathbb{P}_{ex}} - 1}, \quad (3.17)$$

isolando λ , obtemos

$$\lambda = 1 - \frac{1}{\mathbb{P}_{ex}} + \frac{2}{e^{2\mathbb{P}_{ex}} - 1}$$

Portanto, encontrou-se o valor de λ que dá o esquema de diferença finita exponencial adequado, o qual também é conhecido como o Método Scharfetter-Gummel.

A nova *condição de Pécelet* associada à equação de Difusão-Advecção (3.15) é definida como

$$\mathbb{P}_{\text{SG}ex}^* = \frac{|v|}{2\alpha_{\Delta x}} \Delta x = \frac{\mathbb{P}_{ex}}{(1 + \lambda\mathbb{P}_{ex})},$$

e,

$$\mathbb{P}_{\text{SG}ey}^* = \frac{|v|}{2\alpha_{\Delta y}} \Delta y = \frac{\mathbb{P}_{ey}}{(1 + \lambda\mathbb{P}_{ey})}.$$

A continuação, considere a equação

$$\begin{cases} -\alpha C''(x) + vC'(x) = 0, \\ C(0) = 0, \\ C(1) = 1. \end{cases} \quad (3.18)$$

Na Figura 2, mostra-se a solução exata da equação (3.18), e sua solução numérica usando diferenças finitas centradas, onde os valores dos parâmetros são: $\alpha = 0.05$, $v = 0.2$ e $\Delta x = 0.2$. Esta Figura mostra as oscilações que ocorrem quando a condição de Pécelet é maior que 1. Neste caso, a condição de Pécelet dá um valor igual a 2.

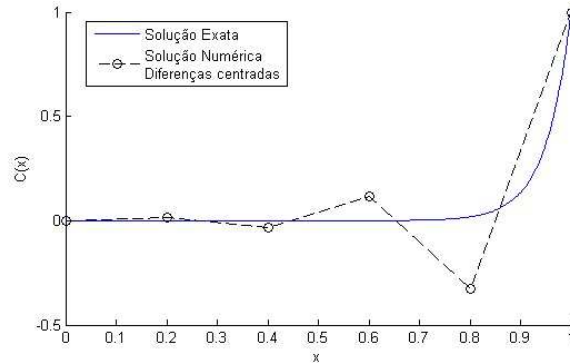


Figura 2: Comportamento oscilatório do método de diferenças finitas centradas, com condição de Pécelet maior que 1.

A Figura 3, mostra a comparação entre a solução exata, o método Upwind (ver: LeVeque, 2007), e o Esquema Scharfetter-Gummel. Os valores dos parâmetros usados são: $\alpha = 0.004$, $v = 1,5$ e $\Delta x = 0.01$, o que dá um

valor de 1,875 para a condição de Péclet do método de diferenças finitas centradas. Já com o método Upwind, a nova condição de Péclet é igual a 0,6522; enquanto com o Esquema Scharfetter-Gummel, pode-se observar uma melhor aproximação numérica. A nova condição de Péclet dá um valor igual a 0,9540.

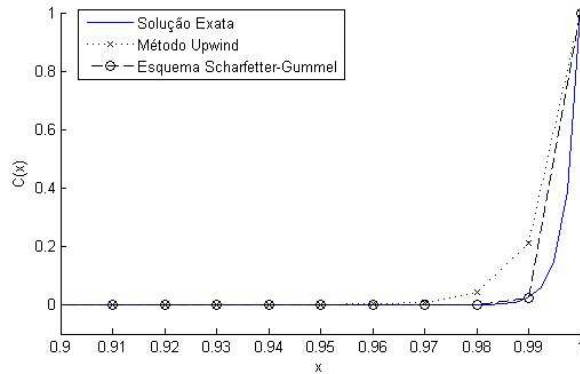


Figura 3: Comparação entre a solução exata, o método Upwind e o Esquema Scharfetter-Gummel, usando difusão artificial.

4 Simulações

Apresentam-se alguns ensaios numéricos do modelo (3.3), para simular a dispersão de poluentes por agrotóxicos no Lago Titicaca. Uma distribuição inicial de concentração de poluente foi considerada em alguns nós da fronteira. A Tabela 1, mostra os parâmetros usados para todos os cenários.

Tabela 1: Parâmetros usados nas simulações.

Parâmetros	Valor	Parâmetros	Valor
Δx	0,5217 km	Δt	0,12 h
Δy	0,4870 km	f	0
α	0,005 km ² /h	T	192 h
μ	0,001 h ⁻¹	it	1600
H	156 km	L	145,6 km

H e L representam o comprimento e largura do domínio respectivamente.

O número total de nós da malha utilizada para as simulações foi 32.936, e os números de Péclet são: $\mathbb{P}_{ex} = 11,2687$ e $\mathbb{P}_{ey} = 10,5192$, que usando métodos clássicos de diferenças finitas, originaria a instabilidade numérica. Já com a difusão artificial, usando o esquema Scharfetter-Gummel, obtem-se um novo número de Péclet igual a 0,9999, o que claramente implica na estabilidade do método numérico.

A velocidade média considerada é de 2 m/s , tomada a 10 metros de altura. Para obter a velocidade superficial do lago, será usada a Equação de Ekman (ver: Oliveira, 2003), assim temos uma velocidade igual a $0,216 \text{ km/h}$.

4.1 Cenário 1: Vento Noroeste

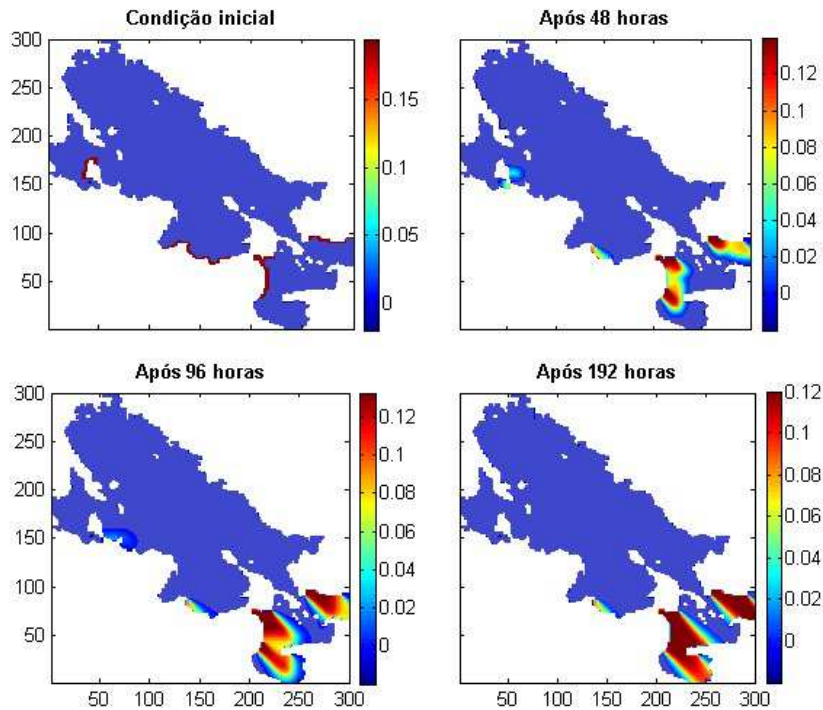


Figura 4: Dispersão da concentração do poluente no lago com vento Noroeste.

Na Figura 4, pode-se perceber o efeito difusivo-advectivo na evolução do material impactante (sendo estes pesticidas e fertilizantes). Após o tempo de

simulação, observou-se uma redução de poluentes do 40% na zona inferior do lago. Apresentam-se quatro gráficos para diferentes tempos de simulação.

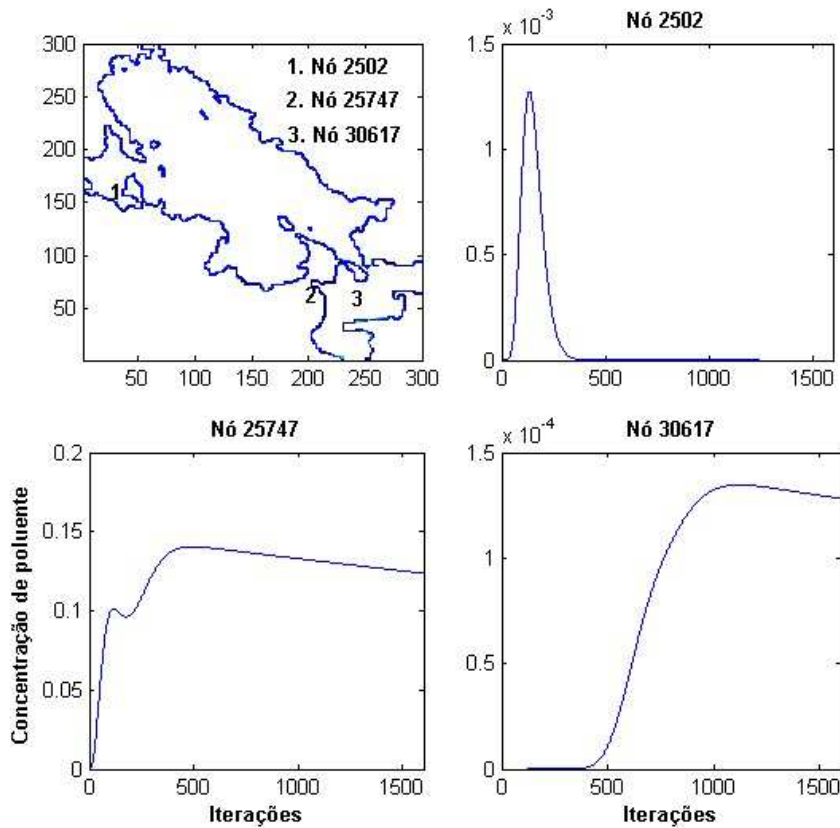


Figura 5: Comportamento pontual da concentração do poluente em diferentes nós do domínio, vento Noroeste.

A Figura 5, mostra o comportamento ao longo do tempo de três nós do domínio, sua localização é dada no primeiro gráfico. No gráfico do nó 2.502, onde não há uma concentração inicial de poluentes, percebe-se sua chegada nas primeiras iterações, também após um certo período de tempo, observa-se um rápido decaimento de poluente.

O gráfico do nó 25.747 apresenta a maior concentração de poluente igual a 0,14 uc* após 450 iterações. Depois de certo período de tempo há um de-

*uc representa unidades de concentração de poluente.

caimento na concentração. Já no gráfico do nó 30.617, onde inicialmente não há concentração de poluente, observa-se sua chegada neste ponto após 380 iterações.

4.2 Cenário 2: Vento Nordeste

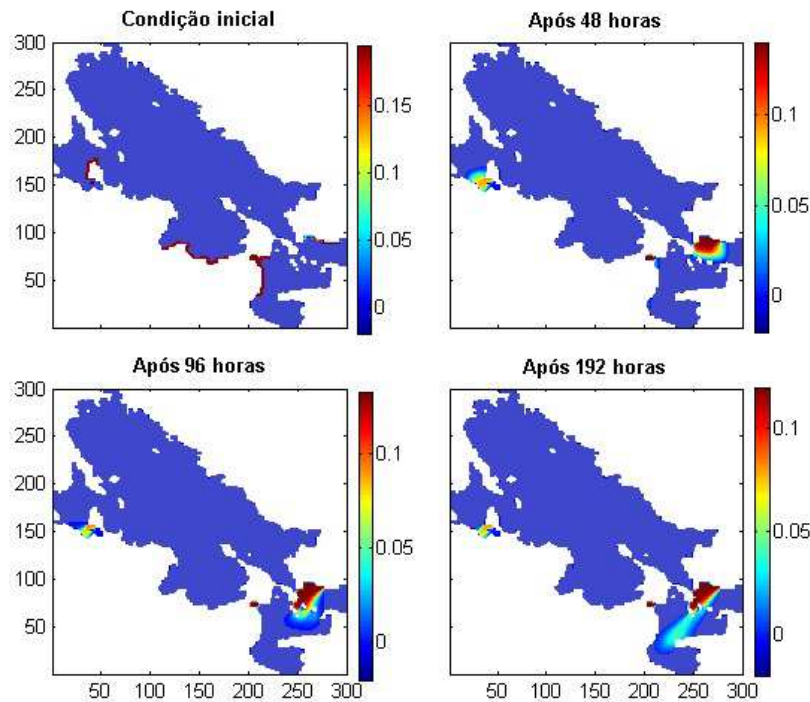


Figura 6: Dispersão da concentração do poluente no lago com vento Nordeste.

Da Figura 6, observa-se que este vento, comparado com o vento do cenário 1, foi favorável para obter menos setores do lago com presença a do poluente.

Na Figura 7, observase-se que os nós 2.502 e 30.617 comparados com as simulações do cenário 1, atingiram uma maior concentração de poluente. Já no nó 25.747, devido à geomorfologia do lago e ao vento, a máxima concentração obtida após 150 iterações, foi menor comparada com o resultado do cenário 1.

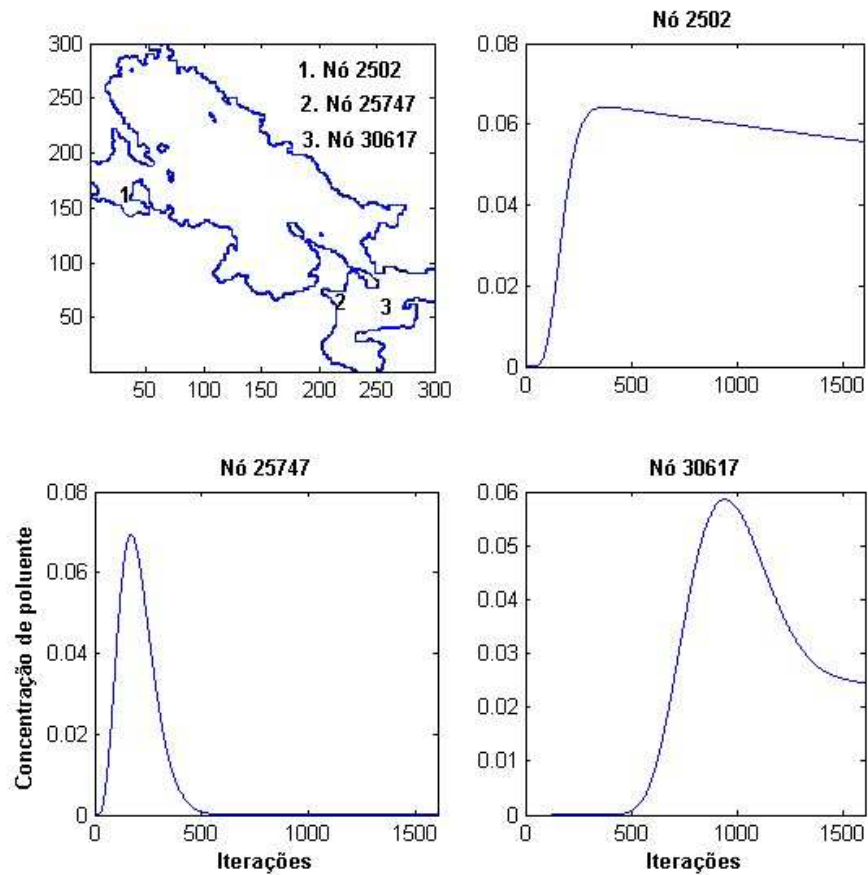


Figura 7: Comportamento pontual da concentração do poluente em diferentes nós do domínio, vento Nordeste.

5 Conclusões

Foram simulados vários cenários, utilizando os ventos mais predominantes, e o esquema Scharfetter-Gummel que garante boas aproximações. Mesmo com a falta de dados para estimar os parâmetros das simulações, pode-se avaliar qualitativamente o comportamento dos poluentes no Lago Titicaca. Assim, esta pesquisa é um importante ponto de partida, que facilita o estudo de outros cenários possíveis, com outros tipos de poluentes ou fontes poluidoras.

Poderia-se dar uma estimativa do tempo de recuperação das águas, se as entidades governamentais viessem a implementar mecanismos de mitigação ao problema de agrotóxicos.

Agradecimentos

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

Referências

- Cajas Guaca, D. (2015). Impacto ambiental em meios aquáticos: Modelagem, aproximação e simulação de um estudo na Baía de Buenaventura-Colômbia. Dissertação de Mestrado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.
- Cantrell, R. S. e Cosner, C. (2003). *Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations*. Wiley.
- Chagas, I. D. (2009). Os Impactos do Agroquímicos sobre o Meio Ambiente. *Finom/Prominas*.
- Diniz, G. L. e Campos F^o, L. F. M. (2010). Contaminação metropolitana do Rio Cuiabá: modelagem e simulação de cenários. *Biomatemática*, 20:93–102.
- Ferrari, A. (1986). Agrotóxico: a praga a dominação. pag. 110–112.
- LeVeque, R. J. (2007). *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*, volume 98. SIAM.
- Okubo, A. e Levin, S. A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer.
- Oliveira, R. F. (2003). *O Comportamento Evolutivo de Uma Mancha de Óleo na Baía de Ilha Grande, RJ: Modelagem, Análise Numérica e Simulações*. Tese de Doutorado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.
- Prestes, M. F. B., Meyer, J. F. C. A., e Poletti, E. C. C. (2013). Dispersão de material impactante em meio aquático: modelo matemático, aproximação numérica e simulação computacional-Reservatório do Salto Grande, Americana-SP. *Biomatemática*, 23:43–56.

Quarteroni, S. e Saleri (2000). *Numerical mathematics*. Springer, Berlin.

Rosas, A. A. (2005). El número de Péclet y su significación en la modelación de transporte difusivo de contaminantes. Dissertação de Mestrado, Facultad de Ciencias, UNAM, México.

Scharfetter, D. e Gummel, H. (1969). Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator. *IEEE Transaction on Electron Devices*, 16.

